

Кулоны нэг компонентот плазмын термодинамик хэмжигдэхүүнүүд

Ц. Цогбаяр*, Ц. Банзрагч, Х. Цоохүү

ШУА, Физик технологийн хүрээлэн

Орнстейн-Зерникийн интеграл тэгшитгэлийн онолыг нэг-компонентот классик плазмын хувьд хэрэглэв. Гиперхолбоост хэлхээ ойролцооллод системийн даралт, бөөмийн дотоод энерги, илүүдэл чөлөөт энерги болон химийн потенциалыг плазмын холбоосын параметр $\Gamma = 1 - 170$ үед тооцоолов. Даралт, чөлөөт энерги болон химийн потенциалыг аналитик илэрхийлэл хэрэглэж бодов. Мөн чөлөөт энергийг термодинамикийн интеграл бодох замаар тооцоолов. Тооцоолон бодсон дотоод энерги, даралт, чөлөөт энергийн утгуудыг нарийвчлал сайтай Монте-Карло аргаар тооцоолсон үр дүнтэй, харин илүүдэл химийн потенциалын утгыг хөндөх онолоор тооцоолсон үр дүнтэй тус тус харьцуулав. Харьцуулалтаас харахад гиперхолбоост хэлхээ ойролцоол нь Монте-Карло аргаар тооцоолсон үр дүнтэй жишихүйц үр дүн өгч байна. Түүнчлэн Кулоны плазмын шингэн-хатуу төлөвийн фазын шилжилтийг авч үзлээ.

I ОРШИЛ

Классик нэг-компонентот плазмыг (НКП) ион агуулсан бөмбөлөг нь эсрэг цэнэгжсэн нэгэн-төрөл фон (дэвсгэр) бүхий орчинтой нейтрал байдлаар орших систем гэж загварчлан авч үздэг. Ийм загварчлал тухайлбал, хатуу бие (металл), астрофизикийн плазмын онолд чухал хэрэглээ болдог [1-3]. НКП-ыг Кулоны холбоосын параметр $\Gamma = (Ze)^2/ak_B T$ (энд: Ze -ион-бөөмийн цэнэг, k_B -Больцманы тогтмол, T -температур, $a = (4\pi N/3V)^{-1/3}$ -ионт-бөмбөлөгийн радиус, N -ионы тоо, V - системийн эзлэхүүн) гэх хэмжээсгүй параметрээр нь тодорхойлж болно.

Ийм системийн динамикийг Монте-Карло (МК) арга [1,4-7] болон статистик механикийн өөр нэг арга—интеграл тэгшитгэлийн аргыг (ИТ) [8-11] хэрэглэн судалдаг. Бидний судалгааны арга нь энэхүү ИТ-ийн арга бөгөөд давуу тал нь системийг бүрдүүлэгч бөөмсийн тооноос үл хамаарахын зэрэгцээ тэгшитгэлийн шийд нь системийн бүтцийг тодорхойлох түгэлтийн функцүүдийг шууд өгдөг явдал юм.

Энэ ажлын гол зорилго нь тэнцвэрийн нөхцөлд орших НКП-д ИТ-ийн аргыг гиперхолбоост хэлхээ (ГХХ) ойролцооллод хэрэглэж системийн термодинамик хэмжигдэхүүнүүд болох дотоод энерги, даралт, илүүдэл чөлөөт энерги, химийн потенциалыг Кулоны холбоосын параметрээс хамааруулж тооцоолох явдал юм. Мөн бид даралт, илүүдэл чөлөөт энерги болон химийн потенциалыг корреляцийн функцүүдээр аналитик

илэрхийлэгдэх онцлогийг тооцоондоо ашиглаж, үр дүнг бусад судлаачдын ажилтай харьцуулна.

Энэхүү ажил нь онолын хэсэг, үр дүн, хэлэлцүүлэг болон дүгнэлт гэсэн үндсэн 4 хэсгээс бүрдэнэ.

II ОНОЛЫН ХЭСЭГ

Орнстейн-Зерникийн тэгшитгэл

Статистик физикт системийн бүтцийг дүрслэх нийт корреляцийн функцийг ИТ-ийн онолыг ашиглан гаргаж авч болдог. Нэгэн төрөл, нэг-компонентот, $\rho = N/V$ -нягттай системийн хувьд Орнстейн-Зерникийн (ОЗ) ИТ нь

$$h(r) = c(r) + \rho \int c(|r - r'|)h(r')dr' \quad (1)$$

(энд: $h(r)$ ба $c(r)$ нь нийт болон шууд корреляцийн функцүүд) хэлбэртэй байна.

(1) тэгшитгэлд байх корреляцийн хоёр функц хоёулаа мэдэгдэхгүй болохоор тэгшитгэлийг бодоход өөр нэг (туслах) тэгшитгэл хэрэгтэй болдог. Түүнийг хаших харьцаа (*closure relation*) гэж нэрлэх бөгөөд

$$h(r) = \exp[-\beta u(r) + \gamma(r) + B(r)] - 1 \quad (2)$$

(энд: $u(r)$ -системийн бөөмс хоорондын харилцан үйлчлэлийг тодорхойлох потенциал; $\gamma(r) \equiv h(r) - c(r)$ -дам корреляцийн функц; $B(r)$ -гүүр функц; $\beta = 1/k_B T$) хэлбэртэй сонгодог. Нийт корреляцийн функц $h(r)$ нь бөөмийн радиал түгэлтийн функц $g(r)$ -тэй $g(r) = h(1) + 1$ гэж

* tsogbayar_ts@mas.ac.mn

холбогддог. Энэ ажилд хэрэглэх ГХХ ойролцоололд $B(r) = 0$ болно. Өөрөөр хэлбэл, бид нягтаас хамаарах зэрэгт цуваа бүхий үл эмхэтгэгдэх диаграммуудаар илэрхийлэгдэх энэ хэмжигдэхүүний нөлөөллийг тооцохгүй. Түүнчлэн, Кулоны харилцан үйлчлэлтэй системийн хувьд $\beta u(r) = (1/k_B T)((Ze)^2/r) = \Gamma/r$ болно.

Бодолтын процесс

Энгийн нэг-компонентот хатуу-бөмбөлөг эсвэл Леннард-Жонс потенциал бүхий хий/шингэний хувьд (1) тэгшитгэлийг (2) хаших харьцаатай хослуулан шууд байдлаар (ямар нэгэн хувиргалт хийхгүйгээр) өөртөө зохицох аргаар бодож болно [12,13]. Харин Кулоны харилцан үйлчлэлтэй системийн хувьд дээрх аргаар ОЗ тэгшитгэлийг бодоход хүндрэл учирдаг. Учир нь холбоосын параметр их үед (хүчтэй харилцан үйлчлэлтэй орны тохиолдолд ($\Gamma \gg 1$)) итерацийн арга нь нийлсэн шийд өгдөггүй. Энэ нь Кулоны потенциал холын зайд алгуур буурдагтай холбоотой. Иймд системийн хувьд ИТ-ээ бодохдоо Кулоны потенциалыг ойрын (o) болон холын (x) зайн гэсэн хоёр хэсэгт хуваах явдал юм [8,9]. Энэ үед ГХХ ойролцоололд радиал түгэлтийн функцийг, зөвхөн ойрын зайн харилцан үйлчлэлт хэлбэрээр илэрхийлбэл

$$g = e^{-\beta u + h - c} = e^{-\beta u_o + \gamma_o} \quad (3)$$

(энд: $c_o = c + \beta u_x$ ба $\gamma_o = h - c_o = \gamma - \beta u_x$) болно.

Үүнд харгалзуулан ОЗ тэгшитгэлийг бодох ерөнхий схем (алгоритмыг) бичвэл:

$$\begin{aligned} c_o &= e^{-\beta u_o} - 1 \\ c_o &\rightarrow \hat{c}_o \\ \hat{c} &= \hat{c}_o - \beta \hat{u}_x \\ \hat{h} &= (1 - \rho \hat{c})^{-1} \hat{c} \\ \hat{\gamma}_o &= \hat{h} - \hat{c}_o \\ \hat{\gamma}_o &\rightarrow \gamma_o \\ c_o &= e^{-\beta u_o + \gamma_o} - \gamma_o - 1 \end{aligned}$$

ба үүнийг нийлэлтийн шалгуур хангатаг давтана. Энд \hat{h} нь (1) тэгшитгэлийг Фурье огторгуйд бичсэн хэлбэр ба малгай тэмдэглэгээ нь Фурье хувиргалтыг тэмдэглэсэн болно.

Кулоны потенциалын ойрын болон холын үйлчлэлийг

$$\beta u_o = \frac{\Gamma}{r} [1 - \text{erf}(ar)] \quad (4)$$

$$\beta u_x = \frac{\Gamma}{r} \text{erf}(ar)$$

(энд: erf нь алдааны функц; a нь тогтмол тоо ба манай ажилд $a = 1$) гэж сонгосон. (4) тэгшитгэлийн холын зайн үйлчлэл нь Фурье огторгуйд

$$\beta \hat{u}_x = \frac{4\pi\Gamma}{k^2} e^{-k^2/4a} \quad (5)$$

гэсэн аналитик хэлбэртэй байдаг нь тооцоог хялбар болгож өгдөг. Энэхүү схемийг дахин-нормчлол ч гэж нэрлэдэг ба үүнийг хэрэглэж ИТ бодсон жишээнүүдийг Цогбаярын гитхаб-аас харж болно [14].

ОЗ тэгшитгэлийг бид хаших тэгшитгэлтэй хослуулан Пикардын итерацийн аргаар дээр дурдсан схемийн дагуу бодсон. Ингэхэд тооцооны эхэнд хаших харьцаа ($c(r)$) нь захын нөхцөлийн үүрэг гүйцэтгэнэ. Тооцоонд дараалсан хоёр итерацийн дам корреляцийн функцүүдийн хоорондох ялгаварт 10^{-10} нийлэлтийн шалгуур тавьсан ба уртын интервал $L = 128a$, торон цэгүүдийн тоо $N = 8192$ болно.

Термодинамик хэмжигдэхүүнүүд

Физик системийн түгэлтийн функцүүдийг мэдсэнээр термодинамик хэмжигдэхүүнүүдийг нь тодорхойлох боломжтой.

Дотоод энерги

Сул орны тохиолдолд ($\Gamma < 1$), өөрөөр хэлбэл, системд хий шинж давамгайлах үед Дебай-Хакел (Debye-Huckel) (ДХ) ойролцоолол хүчинтэй байдаг. Ийм тохиолдолд, системийн нэг бөөмд ноогдох дотоод энерги нь

$$\frac{\beta U_{\text{ДХ}}}{N} = -\frac{\sqrt{3}}{2} \Gamma^{3/2} \quad (6)$$

болно [7].

Харин ИТ-ийн шийд—нийт корреляцийн функцээр нэг бөөмийн дотоод энерги нь

$$\frac{\beta U}{N} = \frac{\rho}{2} \int (\beta u) h d\mathbf{r} \quad (7)$$

гэж илэрхийлэгддэг. (7) илэрхийлэлд бид фоны нөлөөг тооцсон болохоор $g(r)$ -ийн оронд $h(r)$ -ийг авсан [1].

Түүнчлэн, дотоод энергийн хувьд Монте-Карло аргын үр дүнтэй нийцүүлж (fitted) гарган авсан аналитик илэрхийлэл нь

$$\frac{\beta U}{N} = a_1 \Gamma + a_2 \Gamma^{1/4} + a_3 \Gamma^{-1/4} + a_4, \quad (8)$$

ба коэффициентууд нь $a_1 = -0.89752, a_2 = 0.94544, a_3 = 0.17954$ болон $a_4 = -0.80049$ [5].

Даралт

Дебай-Хакелийн ойролцоололд төлөвийн тэгшитгэл

$$\frac{\beta p_{ДХ}}{\rho} = 1 - \frac{1}{2\sqrt{3}} \Gamma^{3/2} \quad (9)$$

болно.

Төлөвийн вириал тэгшитгэл

$$\frac{\beta p}{\rho} = 1 - \frac{\rho}{6} \int \frac{\partial \beta u}{\partial r} r g dr \quad (10)$$

болно.

ГХХ ойролцоололд чөлөөт энергийн илэрхийлэл ашиглан олсон даралтын аналитик илэрхийлэл нь

$$\begin{aligned} \frac{\beta p}{\rho} = 1 + \frac{\rho}{2} \int \left(\frac{h^2}{2} - (c_0 + \beta u_0) \right) dr \\ - \frac{1}{2} \frac{1}{8\pi^3} \int \left(\frac{1}{\rho} \ln|1 - \rho \hat{c}| \right. \\ \left. + \hat{h} \right) dk \quad (11) \end{aligned}$$

болно.

Түүнчлэн, (10) төлөвийн вириал тэгшитгэлд Кулоны потенциалыг тавихад

$$\frac{\beta p}{\rho} = 1 + \frac{1}{3} \frac{\beta U}{N} \quad (12)$$

гэсэн дотоод энергиэр илэрхийлэгдэх хялбар аналитик илэрхийлэл гаргаж авч болно.

Илүүдэл чөлөөт энерги

Дебай-Хакелийн ойролцоололд Гельмгольцын илүүдэл (и) чөлөөт энерги

$$\frac{\beta A_{ДХ}^и}{N} = -\frac{1}{\sqrt{3}} \Gamma^{3/2} \quad (13)$$

болно.

ГХХ ойролцоололд энэ нь

$$\begin{aligned} \frac{\beta A^и}{N} = \frac{\rho}{2} \int \left(\frac{h^2}{2} - (c_0 + \beta u_0) \right) dr \\ + \frac{1}{2} \frac{1}{8\pi^3} \int \left(\frac{1}{\rho} \ln|1 - \rho \hat{c}| \right. \\ \left. + \hat{c} \right) dk \quad (14) \end{aligned}$$

гэсэн аналитик илэрхийллээр бодогдоно.

Түүнчлэн энэ чөлөөт энергийг

$$\frac{\beta A^и}{N} = \frac{\rho}{2} \int_0^1 d\lambda \int \frac{\partial \beta u(r, \lambda)}{\partial \lambda} g(r, \lambda) dr \quad (15)$$

болон

$$\frac{\beta A^и}{N} = \frac{\rho}{2} \int_0^1 \frac{\beta U(\Gamma')}{N \Gamma'} d\Gamma' \quad (16)$$

гэх термодинамикийн интеграл бодох замаар олж болно. (15) тэгшитгэлийн шилжсэн Кулоны потенциал $u(r, \lambda)$ нь холбоосын тогтмол λ -тай шугаман хамааралтай байна, өөрөөр хэлбэл, $u(r, \lambda) = \lambda u(r)$.

Илүүдэл чөлөөт энергийн хувьд Монте-Карло аргын үр дүнг өгөх аналитик илэрхийлэл нь

$$\begin{aligned} \frac{\beta A^и}{N} = a_1 \Gamma + 4(a_2 \Gamma^{1/4} + a_3 \Gamma^{-1/4}) + a_4 \ln \Gamma - [a_1 \\ + 4(a_2 - a_3) + 0.420] \quad (17) \end{aligned}$$

(энд: (a_1, a_2, a_3, a_4) коэффициентууд нь дээр өгөгдсөн) хэлбэртэй байна [5].

Илүүдэл химийн потенциал

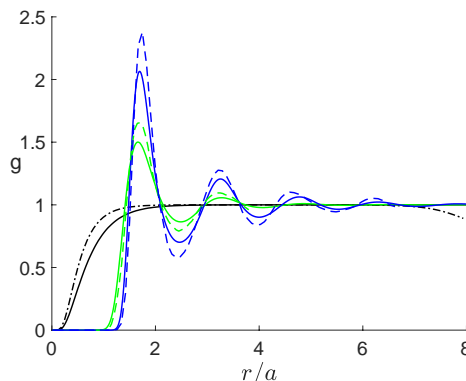
ГХХ ойролцоололд нь илүүдэл химийн потенциал

$$\beta \mu^и = \rho \int \left(\frac{h^2}{2} - (c_0 + \beta u_0) - \frac{1}{2} hc \right) dr \quad (10)$$

болно.

Ш ҮР ДҮН

Зураг 1-д бид ОЗ тэгшитгэлийн шийд болох радиал түгэлтийн функцийг $\Gamma = 1, 50$ болон 160-ийн утгуудад хар, ногоон, хөх өнгөөр ялгаж үзүүлэв. Тасархай хар шугам нь Кулоны потенциалыг ойр/хол гэж хоёр хэсэгт хуваагаагүй үед гаргаж авсан шийд. Эндээс харвал Γ -ийн бага утгад ч шийд нийлэхгүй байгаа нь холын зайнд байгаа хазайлтаас харагдаж байна. Иймд Γ -ийн утга ихсэх үед дахин-нормчлох схемийг хэрэглэх зайлшгүй шаардлагатай. Нийлэлт өгөөгүй шийдийн (тасархай хар шугам) хувьд $L = 8a$ гэж сонгон тооцоог хийсэн болно. Харин бусад



1-р зураг. Радиал түгэлтийн функц: $\Gamma = 1$ (хар), 50 (ногоон) болон 160 (хөх). Монте-Карло аргын үр дүнг тасархай ногоон [1] болон хөх [5] шугамаар үзүүлэв.

тооцоонуудын хувьд өмнө дурдсан уртын интервалыг хэрэглэсэн.

Энд үргэлж шулуун нь ГХХ ойролцоололд гаргаж авсан үр дүн ба тэдгээрийг тасархай (ногоон/хөх) шулуунаар дүрсэлсэн МК аргын үр дүнтэй харьцуулах байдлаар хамтад нь үзүүлэв. Зургаас харвал түгэлтийн функцийг оройн цэгүүдийн байрлал нь бараг давхцах ба утгууд нь бага зэрэг зөрүүтэй байна.

1-р хүснэгт. Нэг ион-бөөмд ноогдох дотоод энерги, $-\beta U/N$.

Γ	(6) тэгш	(7) тэгш	ГХХ [8]	ГХХ [9]	(8) тэгш [5]	МК [4]
0.01	0.001	0.001				
0.1	0.027	0.026	0.026			
0.5	0.306	0.236	0.236		0.241	
1	0.866	0.570	0.570		0.573	
10	27.39	7.935	7.935		7.994	
50	306.2	42.97	42.80		43.09	
100	866.0	86.97		86.97	87.51	
140	1435	122.5		122.5	123.2	
150	1593	131.4		132.1	132.7	132.73
160	1753	140.3		140.3	141.0	141.72
170	1920	149.2			149.9	150.70

2-р хүснэгт. Ион-бөмбөлөгийн даралт, $\beta p/\rho$.

Γ	(9) тэгш	(10) тэгш	(11) тэгш	(12) тэгш [5]	МК [1]
0.01	0.999	0.999	0.999		
0.1	0.991	0.991	0.991	0.987	0.991
0.5	0.898	0.921	0.921	0.919	0.916
1	0.711	0.810	0.810	0.809	0.808
10	-8.129	-1.645	-1.645	-1.665	-1.689
50	-101.1	-13.26	-13.26	-13.37	-13.41
100	-287.7	-27.99	-27.99	-28.17	-28.30
140	-477.2	-39.83	-39.83	-40.05	
150	-529.3	-42.75	-42.75	-43.02	
160	-883.2	-45.75	-45.75	-46.00	
170	-638.9	-48.72	-48.72	-48.97	

Хүснэгт 1-д нэг бөөмд ноогдох дотоод энергийг Γ -ийн утгаас хамааруулж үзүүлэв. Хүснэгтийн 2-дугаар баганад сул орны тохиолдолд хүчинтэй

байх (6) тэгшитгэлийн (тэгш) үр дүнг үзүүлэв. 3-дугаар баганад бүтэн корреляцийн функцээр тооцоолсон үр дүнг үзүүлэв. Үлдсэн багануудад бусад судлаачдын үр дүнг үзүүлэв. 6-дугаар баганад МК аргаар тооцоолсон үр дүнтэй жишихүйц үр дүнг өгөх (8) аналитик илэрхийллийн үр дүнг үзүүлэв. Хүснэгтийн харьцуулалтаас харвал ДХ-ийн ойролцоолол нь $\Gamma < 1$ үед ГХХ болон бусад МК аргаар тооцоолсон үр дүнтэй дөхүү байна. Харин $\Gamma > 1$ үед ДХ ойролцооллын алдаа ихсэж байна. Бидний ГХХ үр дүн (3-дугаар багана) нь бусад судлаачдын ГХХ үр дүнтэй (4 ба 5-дугаар багана) давхцаж байгаа бол, МК аргаар тооцоолсон үр дүнгээс (6 ба 7-дугаар багана) бага зэрэг зөрүүтэй байна. Хүснэгт 2-д бид НКП-ийн даралтын утгыг (9)-(12) тэгшитгэлээр тооцоолсон үр дүнг үзүүлэв.

Төлөвийн тэгшитгэлийн вириал болон чөлөөт энергийн хувилбарууд (3 ба 4-дүгээр багана) ижил утга өгөхийн зэрэгцээ МК аргын үр дүнгээс (5 ба 6-дугаар багана) үл ялиг дээгүүр байна. 5-дугаар баганад үзүүлсэн үр дүнг тооцоолоход (8) илэрхийллийг ашигласан болно. Энд тооцоолсон даралт нь (энд үзүүлсэнчлэн $\Gamma = 10$ -с эхлэн) сөрөг утга авах ч, фоны нөлөөг тооцсон системийн нийт даралт нь үргэлж эерэг утгатай байна [1].

Хүснэгт 3 нь Гельмгольцын илүүдэл чөлөөт энергийн утгыг холбоосын параметрээс хамааруулж үзүүлж байна. Өмнөх хоёр хүснэгтээс ялгаатай нь бид энд нэмэлтээр термодинамикийн интеграл ((13)-(16) тэгшитгэл) бодох замаар тооцоолсонд оршино. Интегралын хувьсагчдын алхам нь $d\Gamma' = 0.2, d\lambda = 0.005$ болно. (14)-(16) тэгшитгэл нь ойролцоо утгууд (3, 4 ба 5-дугаар багана) өгөх ба эдгээр нь МК аргын (6 ба 7-дугаар багана) үр дүнгээс үл ялиг дээгүүр байна.

Бидний тооцоолсон термодинамик хэмжигдэхүүний сүүлийнх нь илүүдэл химийн потенциал болно. Илүүдэл химийн потенциалыг (18) тэгшитгэлээр бодсон үр дүнг Хүснэгт 4-ийн 2-дугаар баганад үзүүлсэн бол, 3-дугаар баганад бусад судлаачдын зарим үр дүнг үзүүлэв. 3-дугаар баганын үр дүн нь хөндөх онол бүхий ГХХ (ХГХХ) ойролцоололд гаргаж авсан үр дүн ба эдгээрийн хоорондох зөрүү нь бага байна

Бидний тооцоолсон термодинамик хэмжигдэхүүний утгууд нь тооцооллын параметрууд болох уртын интервал, торон цэгүүдийн тоо, интегралын алхам зэргээс үл хамаарсан гэдгийг тэмдэглэж байна.

3-р хүснэгт. Нэг ион-бөөмд ноогдох дотоод энерги, $-\beta A^n/N$.

Γ	(18) тэгш	ХГХХ [1]
0.01	-0.001	
0.1	-0.026	-0.0262
0.5	-0.251	
1	-0.627	-0.627
10	-9.706	-9.76
50	-54.79	
100	-112.7	
140	-159.5	
150	-171.2	
160	-182.9	
170	-194.6	

4-р хүснэгт. Илүүдэл химийн потенциал, $\beta\mu^n$.

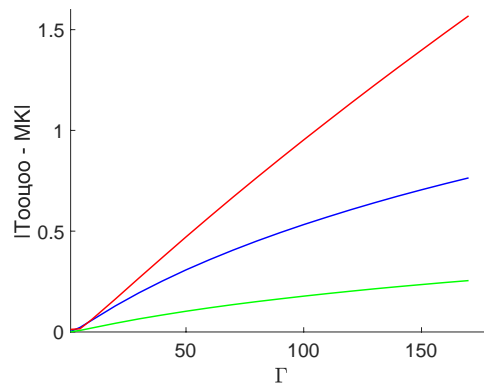
Γ	(13) тэгш	(14) тэгш	(15) тэгш	(16) тэгш	(17) тэгш [5]	МК [1]
0.01	0.001	0.001	0.001	0.001		
0.1	0.018	0.017	0.015	0.016	-0.017	0.016
0.5	0.204	0.171	0.154	0.155	0.154	0.174
1	0.577	0.433	0.397	0.395	0.420	0.451
10	18.26	7.022	6.808	6.819	7.083	7.14
50	204.1	40.34	39.90	40.02	40.81	41.06
100	577.4	83.34	82.84	83.04	84.29	84.68
140	956.4	118.1	117.6	117.8	119.4	
150	1061	126.8	126.3	126.6	128.2	
160	1169	135.5	135.0	135.3	137.0	
170	1280	144.3	143.8	144.1	145.8	

Зураг 2-д дотоод энерги (хөх), даралт (ногоон), илүүдэл чөлөөт энергийн (улаан) хувьд аналитик (7), (11), (14) илэрхийллүүдээр бодсон утга ба МК аргын үр дүн ((8), (12), (17) илэрхийллүүд) хоёрын хоорондын ялгавар |Тооцоо-МК|-ийг холбоосын параметр $\Gamma = 170$ хүртэлх утгад үзүүлэв. Зургаас харвал Γ өсөхийн хэрээр ялгавар нь ихсэж байна. Чөлөөт энергийн ялгавар нь хамгийн их (~ 1.6) бол, даралтын хувьд энэ нь ~ 0.35 байна.

IV ХЭЛЭЛЦҮҮЛЭГ

Энэ ажилд бид тэнцвэрийн нөхцөлд орших плазмын термодинамикийн судалгааг ГХХ ойролцооллод хийв. ОЗ-ийн тэгшитгэлийг

бодохдоо дахин-нормчлол гэх схемийг хэрхэн хэрэглэх механизмыг дэлгэрэнгүй тайлбарлав.



2-р зураг. Тооцоолон бодсон үр дүн ба МК аргын үр дүн хоорондох ялгаврын абсолют утгыг харуулав. Улаан, хөх, ногоон шугамууд нь чөлөөт энерги, дотоод энерги болон даралтад харгалзана.

Ийм механизмыг цэнэгт системийн хувьд ГХХ-оос бусад ойролцооллуудад, тухайлбал Перкус-Иевик [1] болон Цэднээ-Лучко [12] ойролцооллуудад өргөтгөн хэрэглэх боломжтойг тэмдэглэе.

ГХХ ойролцоолол нь гүүр функцийг нөлөөг үл тооцох ч ($B = 0$), термодинамик хэмжигдэхүүний утгыг Кулоны холбоосын параметрын харьцангуй өндөр утгад ч өгөх боломжтой нь Хүснэгт 1-4-ээс харагдаж байна. Харин нарийвчлал сайтай МК аргын үр дүнтэй ижилхэн үр дүн ИТ-ийн онолын хүрээнд гаргаж авахын тулд гүүр функцийг нөлөөг бид зайлшгүй тооцох хэрэгтэй гэдэг нь Зураг 1 болон 2-оос харагдаж байна.

Бид энэ ажилд ИТ-ийн онолын хүрээнд термодинамик хэмжигдэхүүнүүд, тухайлбал даралт, илүүдэл чөлөөт энерги болон химийн потенциал зэргийг аналитик илэрхийлэл ((11), (14), (18) илэрхийллүүд) ашиглан шууд тооцоолох боломжтойг харуулав. Эдгээр илэрхийлэл нь харилцан үйлчлэлийн потенциалын ил хэлбэрийг агуулаагүй болохоор Кулоны төдийгүй, өөр харилцан үйлчлэл бүхий системийн хувьд ашиглах боломжтой. (11), (14), болон (18) илэрхийллүүдийн гаргалгааг бидний өмнөх ажлуудаас [12,13,15] харж болно. Аналитик илэрхийллийн хувьд ИТ-ийг зөвхөн нэг л удаа бодож, шийдийг нь ашигладаг ба үүгээрээ тооцоо хийх хугацааг хэмнэж байдаг. Харин термодинамик интеграл бодож термодинамик хэмжигдэхүүнийг олох үед, интеграл бодох алхам

бүрд ИТ-ээ бодох хэрэгтэй болно. (15) ба (16) илэрхийллийг бид яг тэгж бодсон болно. МК аргаар тооцоолсон үр дүнтэй дүйцэхүйц нарийвчлалтай үр дүн өгөх өгөх (8), (12), (17) аналитик илэрхийллүүдийн гаргалгааг энд бид ярилцахгүй бөгөөд тэдгээрийг [5]-ээс үзэх боломжтой.

Хэлэлцүүлгийн сүүлийн хэсэгт НКП-ын фазын шилжилтийг товч авч үзье. Кулоны холбоосын параметр $\Gamma = 160 - 170$ утгатай болоход Кулоны шингэн-систем нь кристалл торон (body-centered cubic) бүтцэд шилжих фазын хувирал явагдахыг судлаачид тогтоосон байдаг [1,5]. Тухайлбал, нийт чөлөөт энерги нь шингэн төлөвийн хувьд $\frac{\beta A_{ш}}{N} =$

$a_1\Gamma + 4(a_2\Gamma^{1/4} - a_3\Gamma^{-1/4}) + (a_4 + 3)\ln\Gamma - [a_1 + 4(a_2 - a_3) + 1.1350]$ бол кристалл бүтцэд плазмын хувьд $\frac{\beta A_{кр}}{N} = -0.89592925 + \left(\frac{9}{2}\right)\ln\Gamma - 1.8856\Gamma - 1490\Gamma^{-2}$ (энд: (a_1, a_2, a_3, a_4)

коэффициентууд нь дээр өгөгдсөн болно ((8) тэгшитгэлийг харах)) гэх аналитик илэрхийллүүдтэй байна [5]. Энэ хоёр илэрхийллээс шингэн төлөвөөс хатуу төлөвт шилжих шилжилт нь $\Gamma_{ш-кр} = 168.41$ -ийн утгад явагдана гэж бид дүгнэж байна [5]. Эндээс бидний дээр хийсэн тооцоо Кулоны шингэн-плазмын хувьд хамаарагдах нь харагдаж байна. Энэ тэгшитгэл нь $\Gamma = 45.31$ гэсэн өөр нэг шийдтэй бөгөөд, энэ нь физик утгагүй болно.

Бид ОЗ-ГХХ тэгшитгэлийн шийдээ ашиглан дээрх фазын шилжилтийг тооцоолохыг оролдсон. Тухайлбал, [5]-аас Кулоны кристалл бүтцэт плазмын хувьд дотоод энергийн илэрхийлэл $\frac{\beta U_{кр}}{N} = 1.5 - -0.895929256\Gamma + 2980\Gamma^{-2}$ -ийг ашиглаж $\Gamma_{ш-кр} = 64.39$ гэж олсон нь дээрх утгаас ($\Gamma_{ш-кр} = 168.41$) хамаагүй их зөрүүтэй ба энэ нь ГХХ ойролцоолол нь фазын шилжилтийг тооцоолоход тохирохгүй гэдгийг давхар харуулж байна.

V ДҮГНЭЛТ

Энэ ажилд бид тэнцвэрийн нөхцөлд оршин буй Кулоны НКП-ийн термодинамикийг ИТ-ийн онолын хүрээнд судлав. ГХХ хаших тэгшитгэлийн хүрээнд дахин нормчлолын схемийг хэрэглэх арга зүйг тайлбарласан болно. ГХХ ойролцоололд гаргаж авсан ион-бөөмийн дотоод энерги, даралт илүүдэл чөлөөт энерги болон химийн

потенциалыг холбоосын тогтмолын утгаас хамааруулж тооцоолов. Даралт, чөлөөт энерги болон химийн потенциалын хувьд корреляцийн функцүүдээр илэрхийлэгдэх аналитик илэрхийллийг тооцоонд хэрэглэж, гаргаж авсан үр дүнгээ термодинамикийн интеграл ашиглан бодсон үр дүн болон нарийвчлал сайтай МК аргаар тооцоолсон үр дүнтэй харьцуулав. ГХХ ойролцоолол нь холбоосын параметрын өндөр утгад МК аргаар тооцоолсон шиг нарийвчлал сайтай үр дүн өгөхгүй ч, жишихүйц үр дүн өгч байна. Түүнчлэн, Кулоны плазмын шингэн-хатуу төлөвийн фазын шилжилтийн хялбар тооцоог хийж, харгалзах Кулоны холбоосын параметрын утгыг гарган авлаа.

Энд хийсэн тооцоог өөр хаших тэгшитгэлийн ($B \neq 0$) хувьд болон олон компонентот плазмын бодлогод өргөтгөж болох бөгөөд энэ чиглэлд судалгааны ажил үргэлжилж байна.

VI ТАЛАРХАЛ

Энэхүү судалгааны ажлыг санхүүжүүлсэн ШУТ Санд (төслийн дугаар, ШУТБИХХЗГ-2022/167) талархал илэрхийлье.

VI НОМ ЗҮЙ

- [1] Brush, S. G., Sahlin, H. L., and Teller, E., J. Chem. Phys. 45 (1966) 2102.
- [2] Chabrier, G., J., Phys. France 51 (1990) 1607.
- [3] Dubin, D. H. E., O'Neil, T.M., Rev. Mod. Phys. 71 (1999) 71.
- [4] Pollock, E. L., and Hansen, J. P., Phys. Rev. A 21 (1973) 3110.
- [5] Slattery, W. L., Doolen, G. D., and DeWitt, H. E., Phys. Rev. A 21 (1980) 2087.
- [6] Slattery, W. L., Doolen, G. D., and DeWitt, H. E., Phys. Rev. A 26 (1982) 2255.
- [7] Nordholm, S., Chem. Phys. Lett. 105 (1984) 302
- [8] Springer, J. F., Pokrant, M. A., Stevens, Jr. A. F., J. Chem. Phys. 58 (1973) 4863.
- [9] Tsogbayar, Ts., and Luchko, T., Phys. Rev. E 99 (2019) 032130.
- [10] Ng, K. C., J. Chem. Phys. 61 (1974) 2680.
- [11] Lado, F., Foiles, S. M., Ashcroft, N. W., Phys. Rev. A 28 (1983) 2374.
- [12] Tsogbayar, Ts., and Luchko, T., Phys. Rev. E 99 (2019) 032130.

[13] Tsogbayar, Ts., Proc. Inst. Phys. Tech., MAS, 48 (2021) 3.

[14] Tsogbayar, Ts., (2019) <https://github.com/tstsog>.

[15] Banzragch, Ts., Tsogbayar, Ts., Tsookhuu, Kh., Proc. Inst. Phys. Tech., MAS, 48 (2021) 63.