

THỂ MÀN CHẮN TRONG PLASMA OCP BẮT ĐẦU KẾT TINH VÀ CHO PLASMA BIM CARBON-OXY

ĐỖ XUÂN HỘI*

Như đã được trình bày trong một số công trình gần đây [1, 2], plasma một thành phần (OCP- One Component Plasmas) bắt đầu chuyển từ trạng thái lưu chất sang trạng thái tinh thể mang lập phương tâm khối *bcc* khi tác dụng của tương tác tầm ngắn (short range order) đủ lớn để khống chế chuyển động nhiệt hỗn loạn của các ion tạo thành plasma. Nếu mối tương quan giữa thế năng tương tác Coulomb trung bình $\frac{(Ze)^2}{a}$ giữa hai ion có điện tích Ze cách nhau một khoảng a (a là bán kính khối cầu ion) và thế năng của chuyển động nhiệt kT được đặc trưng bởi tham số tương quan $\Gamma = \frac{(Ze)^2}{akT}$, thì các công trình lí thuyết [3] đã chỉ ra rằng trạng thái kết tinh của plasma OCP bắt đầu xảy ra khi $\Gamma_m = 172$. Giá trị của thế màn chắn tại giá trị này của tham số tương quan đã được khảo sát và đã được so sánh với kết quả số cho bởi mô phỏng Monte Carlo [1]. Tuy nhiên, theo các kết quả gần đây hơn cung cấp bởi kết quả “thực nghiệm” trên máy tính thì plasma OCP kết tinh ở giá trị $\Gamma_m = 175$ [4]. Do đó, trong bài báo này, ta sẽ thử áp dụng phương pháp tổng quát đã được trình bày trong [2, 5] để tìm biểu thức của thế màn chắn tại giá trị này của tham số tương quan. Đồng thời, phương pháp này cũng sẽ được sử dụng để thử tìm một biểu thức cho thế màn chắn trong plasma hỗn hợp hai thành phần carbon-oxy, kết quả có được sẽ được đối chiếu với kết quả mô phỏng Monte Carlo cho loại plasma này.

I. THỂ MÀN CHẮN Ở TRẠNG THÁI CÂN BẰNG LƯU CHẤT - TINH THỂ

Như đã được đề nghị trong [1, 2], giá trị của thế màn chắn đối với $\Gamma_m = 172$ có dạng:

$$H = 1.0521 - 0.25r^2 + 0.04392r^4 - 0.004269r^6, r \in [0.0, 2.0]. \quad (1)$$

Chú ý rằng trong hệ thức trên, thế màn chắn H là hàm số chẵn theo r , phù hợp với định lí Widom cho lưu chất [6], đồng thời, hệ số của r^2 có giá trị chính xác - 0.25, phù hợp với các tính toán lí thuyết thực hiện bởi Jancovici [7].

* Khoa Vật lý, Trường Đại học Sư phạm Tp.HCM.

Tuy nhiên, để có được giá trị của thế màn chắn chính xác hơn, và đồng thời, để có thể bao phủ được cực đại thứ nhất của hàm phân bố xuyên tâm, tức là có giá trị cho khoảng cách liên ion lớn hơn ($r \in (0.0, 2.72]$), ta có thể vận dụng các hệ thức cho thế màn chắn trong plasma OCP [2, 5]:

$$H(r) = \sum_{i=0}^6 (-1)^i h_i r^{2i}, \tag{2a}$$

với:

$$h_i = \sum_{k=0}^5 a_k (\ln \Gamma)^k \quad (i=1-6), \tag{2b}$$

và a_k là các giá trị cho bởi bảng sau:

	h_0	$10^2 h_2$	$10^3 h_3$	$10^4 h_4$	$10^5 h_5$	$10^6 h_6$
a_0	9.39E-01	5.23E+00	3.85E+00	-3.97E+00	-5.91E+00	-8.11E-01
a_1	1.50E-01	-1.92E+00	-2.20E+00	3.66E+00	4.69E+00	-4.13E-01
a_2	-5.21E-02	7.48E-01	1.34E+00	-3.49E-02	1.82E-02	1.28E+00
a_3	7.23E-03	-1.23E-01	-3.49E-01	-4.07E-01	-6.06E-01	-5.91E-01
a_4	-2.95E-04	7.14E-03	3.99E-02	9.17E-02	1.42E-01	1.04E-01
a_5	-9.84E-06	4.63E-05	-1.60E-03	-6.04E-03	-9.83E-03	-6.46E-03

Ta dễ dàng có được:

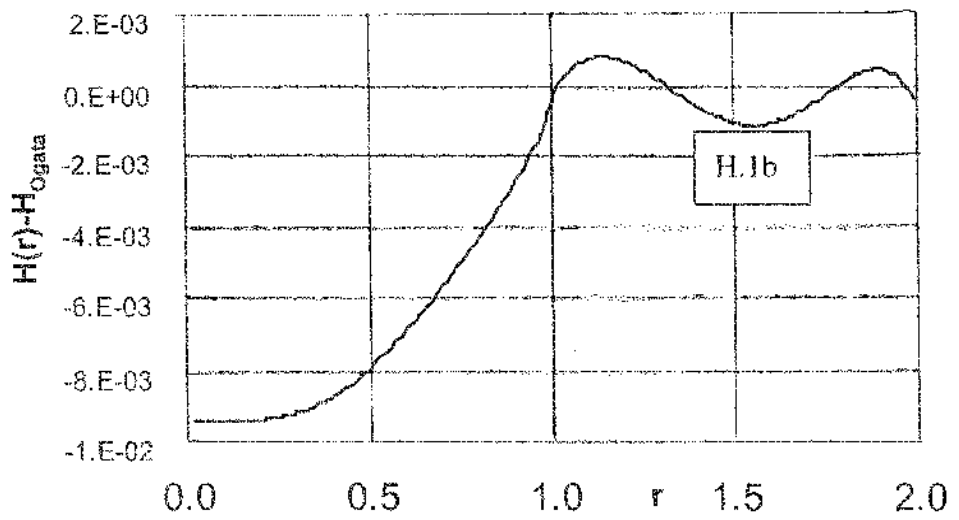
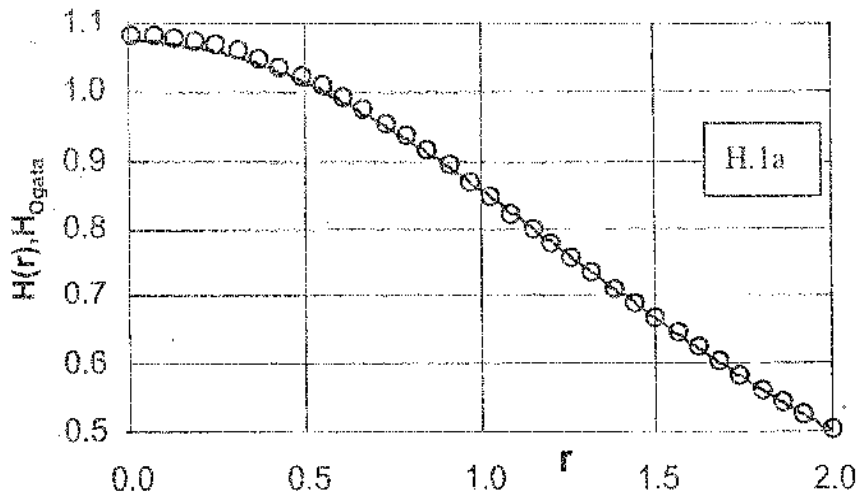
$$H = 1.074187 - 0.25r^2 + 3.570329 \times 10^{-2} r^4 - 2.584468 \times 10^{-3} r^6 + 0.959045 \times 10^{-4} r^8 - 0.37247 \times 10^{-5} r^{10} + 0.177082 \times 10^{-6} r^{12}, \quad r \in [0.0, 2.72] \tag{3}$$

Trên hình H.1a và b, ta có thể thấy độ chính xác của biểu thức (3) ở trên đối với các số liệu Monte Carlo cho bởi Ogata và Ogata *et al* [8, 9].

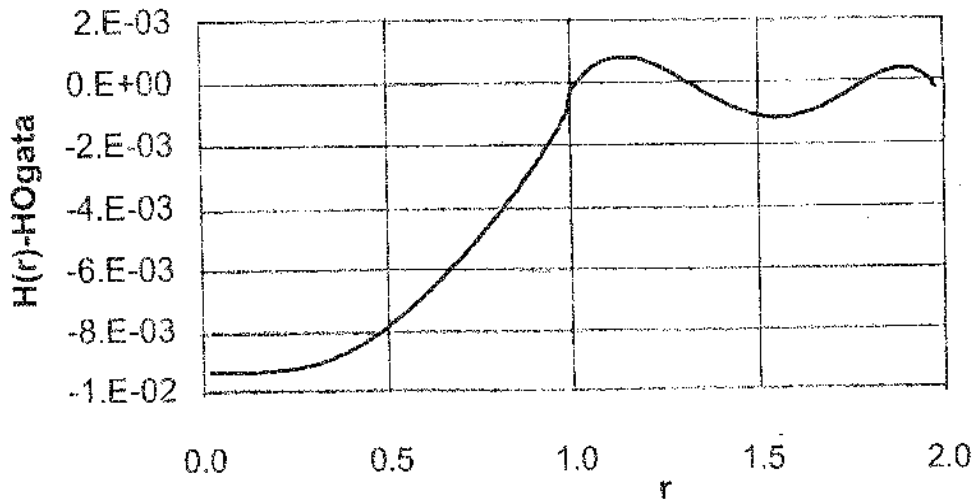
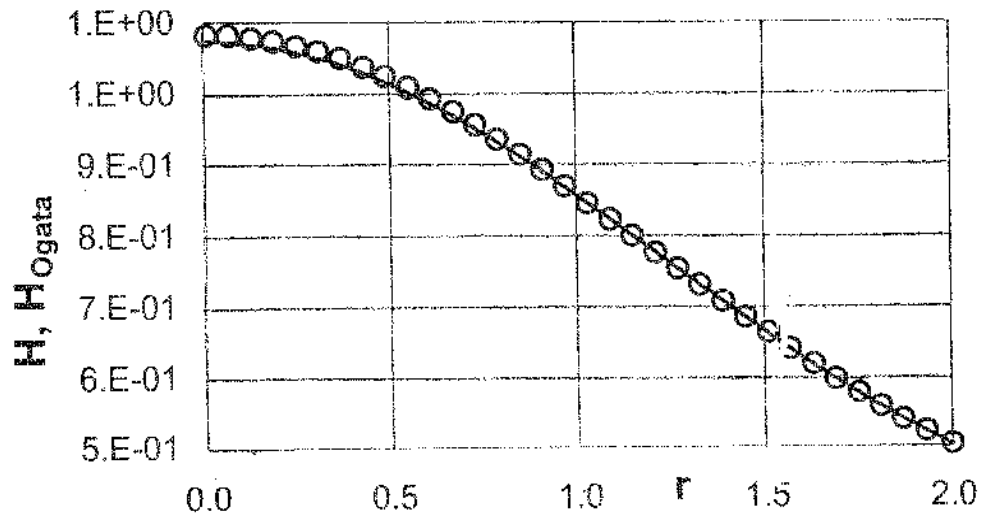
Trong trường hợp $\Gamma_m = 175$ như đã được đề nghị gần đây từ các mô phỏng Monte Carlo [4], ta sẽ có:

$$H = 1.074068 - 0.25r^2 + 3.57143 \times 10^{-2} r^4 - 2.584277 \times 10^{-3} r^6 + 0.954772 \times 10^{-4} r^8 - 0.368846 \times 10^{-5} r^{10} + 0.176755 \times 10^{-6} r^{12}, \quad r \in [0.0, 2.72] \tag{4}$$

Biểu thức trên có độ chính xác tương đối cao, khoảng 1%, so sánh với các dữ liệu của mô phỏng Monte Carlo cho bởi các công trình [8]. (Xem hình H.2a và b).



H.1a và b: So sánh thể màn chắn giữa số liệu Monte Carlo của Ogata và Ogata et al và biểu thức giải tích (3) khi giá trị của tham số tương quan $\Gamma_m = 172$



H.2a và b: So sánh thế màn chắn giữa số liệu Monte Carlo của Ogata và Ogata et al và biểu thức giải tích (4) khi giá trị của tham số tương quan $\Gamma_m = 175$.

II. THẾ MÀN CHẮN ĐỐI VỚI PLASMA HỖN HỢP HAI THÀNH PHẦN OXY-CARBON

1. Mô phỏng Monte Carlo cho plasma BIM oxy-carbon ở trạng thái kết tinh

Hỗn hợp của các hạt mang điện trong một nền gần như đồng nhất của các hạt khác có tác dụng trung hòa điện là một trong các mô hình cơ bản của plasma đậm đặc được tìm thấy ở lõi bên trong của các ngôi sao suy biến. Tùy theo plasma được

cấu tạo bởi một, hai, hay ba loại ion mà được gọi là plasma một thành phần (One Component Plasma – OCP) mà ta đã khảo sát thể màn chắn ở trên, plasma hỗn hợp hai thành phần (Binary Ionic Mixture – BIM), hay plasma hỗn hợp ba thành phần (Ternary Ionic Mixture – TIM). (Tổng quát, ta có plasma hỗn hợp nhiều thành phần (Multi Ionic Mixture – MIM). Đặc biệt, các plasma BIM và TIM là các mô hình thực tế rất gần với cấu tạo của các sao Lùn Trắng. Thật vậy, cho tới nay, phần lớn các sao này được tạo bởi hỗn hợp của carbon và oxy còn lại sau khi khí heli cháy hết, và có thể cũng chứa các nguyên tố như neon và chì, được xem như tạp chất. Vì lí do trên, hầu như ngay sau khi các mô phỏng Monte Carlo được thực hiện cho mô hình OCP, các mô phỏng cùng loại cũng đã được tiến hành cho các mô hình BIM và TIM.

Công thức tổng quát của tham số tương quan cho plasma BIM gồm hai loại ion i (carbon) và j (oxy) có điện tích lần lượt Z_i ($= 6$ nếu là carbon) và Z_j ($= 8$ nếu là oxy) được tính như sau:

$$\Gamma_{ij} = \frac{Z_i Z_j e^2}{a_{ij} kT}, \tag{5}$$

trong đó, a_{ij} là khoảng cách liên ion suy rộng, tính theo các khoảng cách liên ion a_i và a_j cho mỗi loại ion như sau:

$$a_{ij} = \frac{1}{2}(a_i + a_j). \tag{6}$$

Khi đó, thể màn chắn $H_{ij}(R)$ và hàm phân bố xuyên tâm $g_{ij}(R)$ sẽ liên hệ với nhau qua:

$$H_{ij}(R) = \frac{1}{R} + \frac{1}{\Gamma} \ln g_{ij}(R). \tag{7}$$

Từ kết quả mô phỏng Monte Carlo thực hiện cho hỗn hợp carbon – oxy, Ogata *et al* và Setsuo Ichimaru [8] đã đề nghị công thức của thể màn chắn như sau:

$$H(R) = \begin{cases} A - BR + \frac{1}{R} \exp(C\sqrt{R} - D), & 2B \leq R \leq 2 \\ A - B^2 - \frac{1}{4}R^2, & R \leq 2B \end{cases} \tag{8}$$

với các hệ số A, B, C, và D cho bởi:

$$A = 1.66; B = 0.340; C = 13.2; D = 22.5$$

đối với plasma ở trạng thái kết tinh bcc (ta nhận xét rằng khi này thể màn chắn độc lập với tham số tương quan Γ_{ij}), và

$$A = 1.356 - 0.0213 \ln \Gamma_{ij};$$

$$B = 0.456 - 0.0130 \ln \Gamma_{ij};$$

$$C = 9.29 + 0.79 \ln \Gamma_{ij};$$

$$D = 14.83 + 1.31 \ln \Gamma_{ij}$$

cho plasma hai thành phần BIM ở trạng thái lưu chất.

So sánh công thức trên với các biểu thức giải tích (3) và (4) đã được đề nghị cho $\Gamma_m = 172$ và $\Gamma_m = 175$, tức là cho plasma OCP ở trạng thái kết tinh, ta thấy có sự sai biệt đáng kể trong hình H.3, điều có thể hiểu là do biểu thức này đã được đề nghị cho plasma một thành phần OCP. Như vậy, nhận xét đầu tiên là các biểu thức giải tích tổng quát (3) và (4) cho plasma OCP không thể áp dụng được đối với thể màn chắn cho plasma BIM. Điều đương nhiên là ta sẽ phải thiết lập một biểu thức mới, khác với các biểu thức trên cho plasma BIM.

2. Biểu thức của thể màn chắn

Trên cơ sở của lí thuyết đã được khai triển cho plasma OCP [2, 5], chúng tôi đề nghị biểu thức giải tích sau cho thể màn chắn cho plasma BIM carbon – oxy ở trạng thái kết tinh bcc:

$$H(r) = \sum_{i=0}^6 (-1)^i h_i r^{2i}, \tag{9}$$

tức là cũng có dạng của một đa thức bậc chẵn bậc 12 có dấu luân phiên, phù hợp với định lí tổng quát Widom cho các lưu chất, với các hệ số được xác định bởi phương pháp tối thiểu hóa độ lệch :

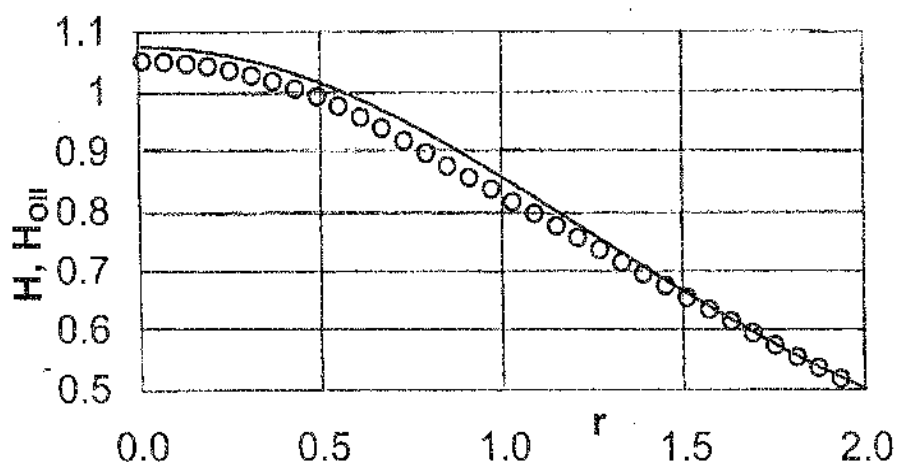
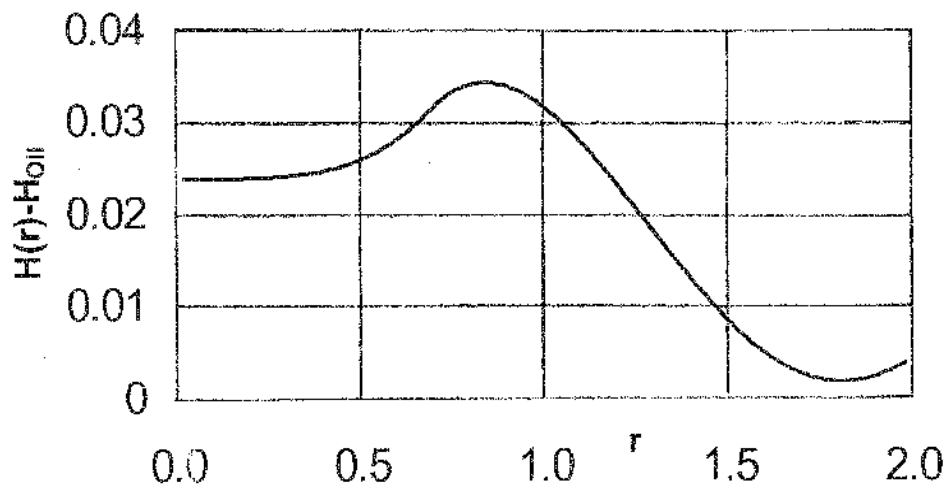
$$Q = \sqrt{\sum_i [g(r_i) - g_{MC}(r_i)]^2},$$

và cho ta kết quả sau:

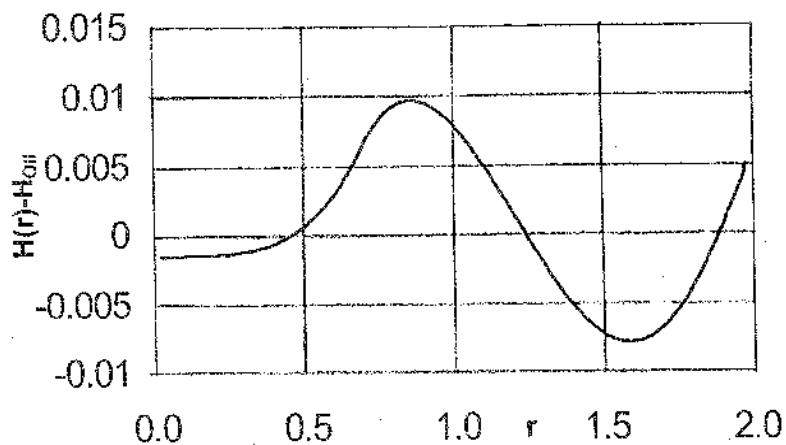
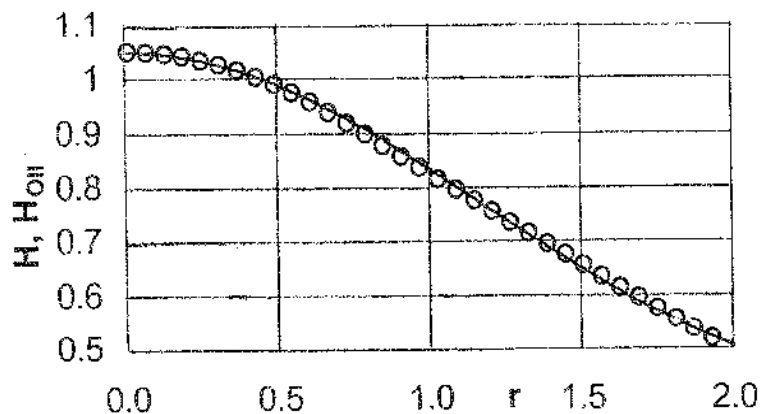
h_0	h_1	$10^3 h_2$	$10^3 h_3$	h_4	$10^5 h_5$	h_6
1.048911	0.25	3.693458	2.032731	0	0.601994	0

Ta có thể nhận xét ngay rằng ở đây, hệ số h_1 cũng có giá trị bằng 0.25 như đối với plasma OCP, giá trị đã được tìm thấy bằng các tính toán lí thuyết của Jancovici [7]. Giá trị này cũng đã được xác nhận trong những kết quả của mô phỏng Monte Carlo gần đây [10]. Như trong hình H.4, ta thấy có sự tương thích khá tốt giữa biểu thức giải tích này so sánh với số liệu Monte Carlo cung cấp bởi Ogata *et al.*

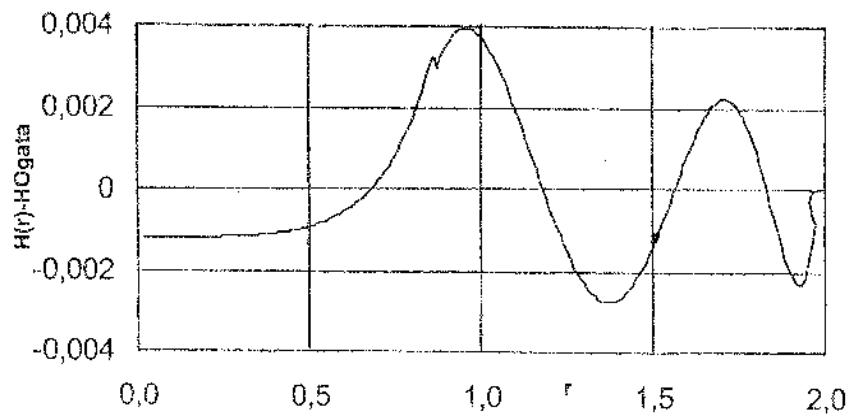
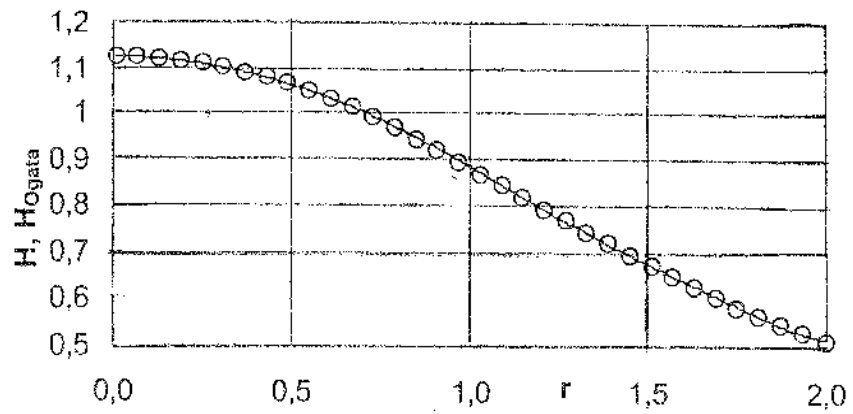
Phương pháp phân tích thể màn chắn ra các thành phần điều hòa và các thành phần phi điều hòa và tham số hóa trật tự địa phương cũng được áp dụng cho plasma BIM ở trạng thái lưu chất cho các giá trị của tham số tương quan $\Gamma = 10, 40$. (Ta luôn có hệ số $h_1 = 0.25$).



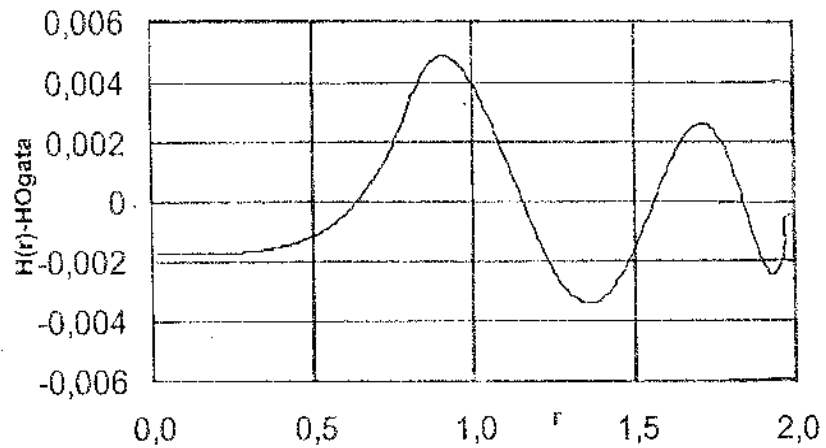
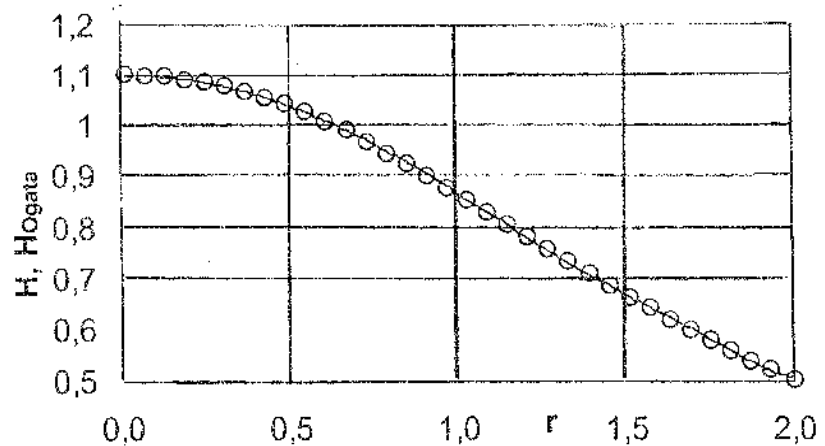
H.3: So sánh giữa biểu thức giải tích của plasma OCP đối với $\Gamma = 172$ với các số liệu Monte Carlo cho plasma BIM của Ogata et al [8]. Độ sai lệch lớn đến 3.5%.



H.4: So sánh giữa biểu thức giải tích đề nghị (biểu thức (9) với giá trị của các hệ số được cho trong bảng) với các số liệu Monte Carlo cho plasma BIM của Ogata et al [8] đối với plasma ở trạng thái kết tinh bcc. Độ sai lệch lớn nhất được nhận xét là khoảng 1.0%.



H.5a: So sánh giữa đa thức Widom và dữ liệu Monte Carlo đối với tham số tương quan $\Gamma = 10$. Sai số lớn nhất được nhận xét là vào khoảng $4,0\%$.



H.5b: So sánh giữa đa thức Widom và dữ liệu Monte Carlo đối với tham số tương quan $\Gamma = 80$. Sai số lớn nhất được nhận xét là vào khoảng 5.0‰.

Γ	h_0	$10^2 h_2$	$10^3 h_3$	$10^4 h_4$	$10^5 h_5$	$10^6 h_6$
10	1.124200	0.423176	0	112.320302	451.752553	507.037162
80	1.101687	1.064093	1.778127	112.645584	450.689013	508.052065

Ta nhận xét trên các hình H.5a và b là sai số của các biểu thức giải tích và số liệu Monte Carlo vào khoảng 5‰.

III. KẾT LUẬN

Trong giới hạn nội dung của bài báo, kết quả tổng quát đã thu được cho plasma một thành phần được vận dụng nhằm mục đích tìm biểu thức của thế màn

chấn cho plasma ở trạng thái cân bằng tinh thể – lưu chất ($\Gamma_m = 172$ hoặc 175) và đồng thời, bước đầu đề nghị các giá trị của thể này cho plasma hỗn hợp hai thành phần carbon – oxy tương thích với các kết quả Monte Carlo đã công bố.

Tác giả xin chân thành cảm tạ các ý kiến đóng góp của PGS. TS. Nguyễn Khắc Nhạp, TS. Thái Khắc Định Khoa Vật lý, trường ĐHSP TP. HCM, cho nội dung bài báo.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] X. H. Do, M. Amari, J. Butaux, and H. Nguyen, (1998), *Screening potential in lattices and high-density plasmas*, Phys. Rev. E **57**, 4627.
- [2] Xuan Hoi Do, (15/12/1999), *Relation entre l'ordre local et le potentiel d'écrantage dans les plasmas*, Luận án Tiến sĩ Đại học Paris VI, Pháp.
- [3] D. H. E. Dubin, (1990), *First-order anharmonic correction to the free energy of a Coulomb crystal in periodic boundary conditions*, Phys. Rev. A **42**, 4972;
- H. Nagara, Y. Nagata, and T. Nakamura, (1987), *Melting of the Wigner crystal at finite temperature*, Phys. Rev. A **36**, 1859.
- [4] H. DeWitt, W. Slattey, D. Baiko, D. Yakovlev, (2001), *Harmonic Lattice Theory of Coulomb Solids and Comparison with Monte Carlo Simulations*, Contrib. Plasma Phys. **41**, 2-3, 251-254.
- [5] Đỗ Xuân Hôi, (12/2001), *Thế màn chắn trong plasma với tham số tương liên $\Gamma \in [5, 160]$* , Tạp chí Khoa học-Khoa học Tự nhiên, trường ĐHSP TP. HCM, số 28, 55-66.
- [6] B. Widom, (1963), *Some Topics in the Theory of Fluids*, J. Chem. Phys. **39**, 2808.
- [7] B. Jancovici, (1977), *Pair Correlation Function in a Dense Plasma and Pycnonuclear Reactions in Stars*, J. Stat. Phys. **17**, 357.
- A. Alastuey and B. Jancovici, (1978), *Nuclear reaction rate enhancement in dense stellar matter*, Astrophys. J. **226**, 1034.
- [8] S. Ogata, H. Iyotomi, and S. Ichimaru, (1991), *Nuclear Reaction rates in dense Carbon-Oxygen mixtures*, Astrophys. J. **372**, 259.
- Setsoo Ichimaru, (1993), *Nuclear fusion in dense plasmas*, Rev. Mod. Phys., **65**, N°2, April.
- [9] S. Ogata, (1996), *Direct Monte Carlo sampling of the short-range screening potentials for classical Coulomb liquids*, Phys. Rev. E **53**, 1094.
- [10] J. -M. Caillol and D. Gilles, (6 June, 2003), *Monte Carlo simulations of the screening potential of the Yukawa one-component plasma*, J. Phys. A: Math. Gen. , 6243-6249.

Tóm tắt:

Thế màn chắn trong plasma OCP bắt đầu kết tinh và cho plasma bin carbon-oxy

Đề nghị các biểu thức của thế màn chắn cho plasma ở trạng thái cân bằng lưu chất – tinh thể và của plasma hỗn hợp hai thành phần carbon – oxy ở trạng thái kết tinh cũng như ở trạng thái lưu chất với giá trị 10 và 80 của tham số tương quan.

Abstract:

**Screening potential in crystallized One Component Plasmas
and in carbon-oxy Binary Ionic Mixture Plasmas**

In this article, the author proposes expressions of screening potential in plasmas of fluid – crystal equilibrium state and of binary ionic mixture plasmas in solid state as well as in fluid state corresponding to value of 10 and 80 of correlation parameter.