УДК 533.9

В. В. Белов, доцент

СТАТИСТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ОДНОКОМПОНЕНТНОЙ ПЛАЗМЫ

The nonlinear integral equation for a simple liquid received earlier is applied in the modified form to the system of charged particles. The equivalent transformation of the equation is performed. As a result the long-distance Coulomb interaction has equivalently replaced by the short range potential of the Debye – Huckel type thus removing the potential divergence of integrals.

Введение. Трудности описания равновесных систем заряженных частиц связаны в первую очередь, как известно, с дальнодействующим характером межчастичного взаимодействия. В случае разреженных сред удается устранить обусловленные кулоновским потенциалом расходимости с помощью специфических разложений функций распределения по плазменному параметру [1], либо суммированием определенного класса диаграмм [2]. Экранирование кулоновского взаимодействия проявляется также при использовании для вычисления конфигурационного интеграла коллективных переменных [3], однако вычисление появляющегося при этом якобиана преобразования опять связано со своеобразными групповыми разложениями [4].

В данной работе предлагается подход к описанию упомянутых систем без предположения о наличии малого параметра.

Устранение расходимости. Рассмотрим простейший вариант однокомпонентной плазмы на однородном компенсирующем фоне, что необходимо для обеспечения электронейтральности такой системы. Ранее в [5] были предложены замкнутые уравнения для описания простой жидкости. В самом младшем приближении, когда полагаются равными нулю неприводимые части всех потенциалов средних сил выше второго, уравнение имеет вид

$$\omega(r) = -\rho\int d^3s h(s) h\left(\left|\mathbf{r}-\mathbf{s}\right|\right). \quad (1)$$

Здесь ω – безразмерная неприводимая часть двухчастичного потенциала средних сил: безразмерность всех потенциалов достигается умножением на $\beta = 1/k_B T$, где k_B – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура; $\rho = N/V$ – плотность; N – число частиц, V – объем системы;

$$h(s) = \exp\left[-\Phi(s) - \omega(s)\right] - 1, \quad (2)$$

$$\Phi(s) = \frac{\beta e^2}{s} - \quad (3)$$

потенциал кулоновского взаимодействия; e – заряд частиц; s – расстояние между их центрами масс.

Интегрирование в (1) ведется по всему пространству. Функция (2) позволяет вычислить одночастичный потенциал средних сил [5]:

$$\varphi = -\frac{\rho}{2}\int d^3s h(s), \quad (4)$$

который определяет конфигурационный интеграл системы

$$Q_N = \left(V\exp(-\varphi)\right)^N; \quad (5)$$

от пространственных переменных φ не зависит.

Корреляционная функция, определяемая выражением (2), содержит дальнодействующий кулоновский потенциал (3). Поэтому обеспечение правильного поведения на бесконечности бинарной функции и, следовательно, само существование интеграла в правой части (1) и термодинамических величин, которые через нее выражаются, возможно лишь в том случае, когда сумма кулоновской части и потенциала средних сил будет короткодействующей. Введем для нее обозначение $\Omega = \Phi + \omega$. Тогда уравнение (1) примет вид

$$\Omega(r) = \Phi(r) - \rho\int d^3s h(s) h\left(\left|\mathbf{r}-\mathbf{s}\right|\right). \quad (6)$$

Прибавим к обеим частям этого уравнения одинаковые выражения:

$$\Omega(r) + \rho\int d^3s \Phi(s)\Omega\left(\left|\mathbf{r}-\mathbf{s}\right|\right) = \Phi(r) +$$

$$+ \rho\int d^3s \Phi(s)\Omega\left(\left|\mathbf{r}-\mathbf{s}\right|\right) - \rho\int d^3s h(s)\left(\left|\mathbf{r}-\mathbf{s}\right|\right). \quad (7)$$

Теперь можно воспользоваться тем обстоятельством, что все интегралы в (7) являются свертками двух функций по пространственным переменным. Это дает возможность осуществить преобразование Фурье обеих частей (7). Определив преобразование Фурье соотношением

$$\tilde{\Omega}(k) = \int d^3r \Omega(r)\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}), \quad (8)$$

получим:

$$\tilde{\Omega} + \rho\tilde{\Phi}\tilde{\Omega} = \tilde{\Phi} + \rho\tilde{\Phi}\tilde{\Omega} - \rho\tilde{h}^2. \quad (9)$$

Для сокращения записи здесь не указана зависимость Фурье-образов от модуля волнового вектора k.

Из (9) следует:

$$\tilde{\Omega} = \frac{\tilde{\Phi}}{1+\rho\tilde{\Phi}} + \rho\frac{\tilde{\Phi}\tilde{\Omega} - \tilde{h}^2}{1+\rho\tilde{\Phi}}. \quad (10)$$

В развернутой форме при учете явного выражения Фурье-образа кулоновского потенциала

$$\tilde{\Phi}(k) = \frac{4\pi\beta e^2}{k^2} \tag{11}$$

уравнение (10) приобретает следующий вид:

$$\tilde{\Omega}(k) = \frac{\kappa^2}{\rho(k^2+\kappa^2)} + \frac{\kappa^2\tilde{\Omega}(k) - \rho k^2 \tilde{h}^2(k)}{k^2+\kappa^2}, \tag{12}$$

где $\kappa^2 = 4\pi\beta\rho e^2$ – дебаевский параметр.

Далее необходимо выполнить обратное преобразование Фурье:

$$\Omega(r) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3k\tilde{\Omega}(k)\exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) =$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2 ir}\int_{-\infty}^{\infty} dkk\tilde{\Omega}(k)\exp(ikr), \tag{13}$$

для осуществимости которого необходимо выполнение условия $k\tilde{\Omega}(k)\to 0$ при $k\to\infty$.

Правая часть (12) выглядит как отношения полиномов различных степеней по k, причем коэффициенты числителя во второй дроби сами являются функциями этой переменной. В самом неблагоприятном случае они могут вести себя как Фурье-образ кулоновского взаимодействия, т. е. могут быть $O(k^{-2})$, и поэтому указанное выше требование выполняется.

Нули знаменателей в (12) $k = \pm i\kappa$ определяют значение интеграла (13), т. е. все особые точки подынтегральных функций, являющиеся простыми полюсами, расположены на мнимой оси. Замыкая контур интегрирования в верхней полуплоскости комплексной переменной k, получим следующее выражение для оригинала первого слагаемого в правой части (12):

$$\frac{1}{(2\pi)^2 ir}\int_{-\infty}^{\infty} dkk\frac{\kappa^2}{\rho(k^2+\kappa^2)}e^{ikr} =$$

$$= \frac{2\beta e^2}{r}\lim_{k\to i\kappa}\frac{k(k-i\kappa)}{k^2+\kappa^2}e^{ikr} = \beta e^2\frac{e^{-\kappa r}}{r}. \tag{14}$$

Оно соответствует дебай-хюккелевскому приближению для парной функции распределения во всех подходах в [1–4]. Оригиналы остальных слагаемых (12) представляют собой свертки Ω и h с этой функцией, поэтому в итоге получается интегральное уравнение

$$\Omega(r) = \beta e^2\frac{e^{-\kappa r}}{r} + \beta e^2\rho\int d^3s\frac{e^{-\kappa s}}{s}\Omega\left(\left|\mathbf{r}-\mathbf{s}\right|\right) -$$

$$-\frac{\rho}{4\pi}\int d^3s_1\int d^3s_2\frac{e^{-\kappa s_1}}{s_1}H(s_2)H\left(\left|\mathbf{r}-\mathbf{s_1}-\mathbf{s_2}\right|\right), \tag{15}$$

эквивалентное исходному уравнению (6), но содержащее лишь экранированное кулоновское взаимодействие. Здесь

$$H(s) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3kk\tilde{h}(k)e^{-i\,\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \tag{16}$$

Этот результат не является специфической особенностью приближения (1). В любых приближениях более высокого порядка вместо (6) фигурирует уравнение

$$\Omega(r) = \Phi(r) - \rho\int d^3sh(s)h\left(\left|\mathbf{r}-\mathbf{s}\right|\right) -$$

$$-\rho\int d^3sg(s)g\left(\left|\mathbf{r}-\mathbf{s}\right|\right)\eta_3\left(r,s,\left|\mathbf{r}-\mathbf{s}\right|\right), \tag{17}$$

где $g = h+1$, $\eta_3 = \exp(-\omega_3)-1$, ω_3 – неприводимая часть трехчастичного потенциала средних сил; уравнение для него содержит лишь функции g, η_3 и η_4.

Структура этого уравнения свидетельствует о том, что и из него с помощью описанного выше преобразования можно исключить дальнодействующий кулоновский потенциал. Следует отметить, что соотношения (4), (5) сохраняют свой вид в любом приближении.

С другой стороны, в работе [6] без каких-либо приближений была получена замкнутая система интегральных уравнений, одним из которых как раз и является (17), а остальные не содержат потенциал взаимодействия в явном виде.

Таким образом, можно утверждать, что экранирование кулоновского взаимодействия является совершенно общим результатом.

Фактическое нахождение величин Ω связано с необходимостью решения нелинейного интегрального уравнения и может быть реализовано только численно. Проведенные расчеты показали, что Ω действительно убывает быстрее обратной третьей степени расстояния. Это отражено на рис. 1.

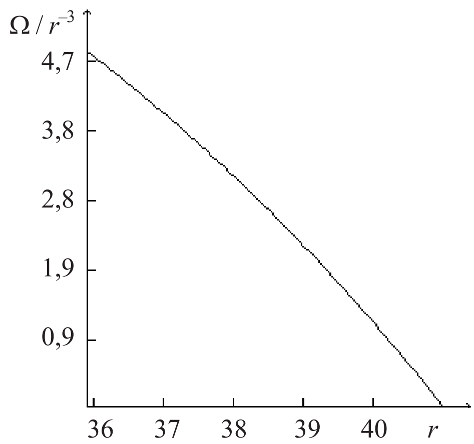

Рис. 1. Поведение Ω / r^{-3} на больших расстояниях

На рис. 2 и 3 представлено сопоставление полученных в данной работе данных (кривые *2*) с приближением Дебая – Хюккеля (кривые *1*), которому соответствует первое слагаемое в правой части (15), при различных плотностях. Видно, что с ростом плотности различия увеличиваются.

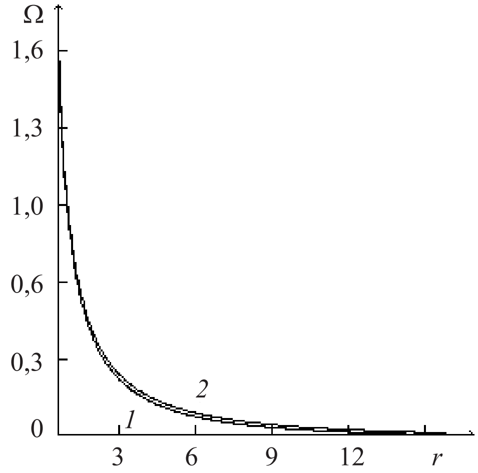

Рис. 2. Сопоставление рассчитанной величины Ω с приближением Дебая – Хюккеля при ρ = 0,001:
1 – приближение Дебая – Хюккеля;
2 – данная работа

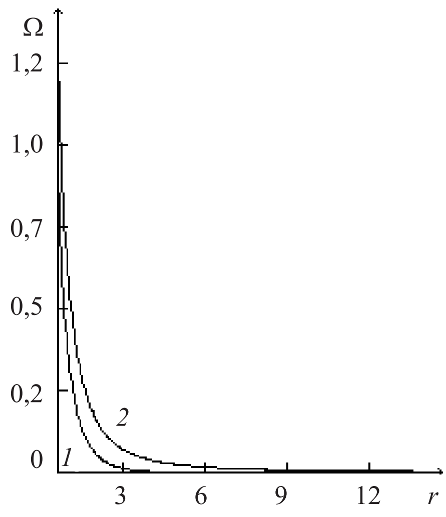

Рис. 3. Сопоставление рассчитанной величины Ω с приближением Дебая – Хюккеля при ρ = 0,1:
1 – приближение Дебая – Хюккеля;
2 – данная работа

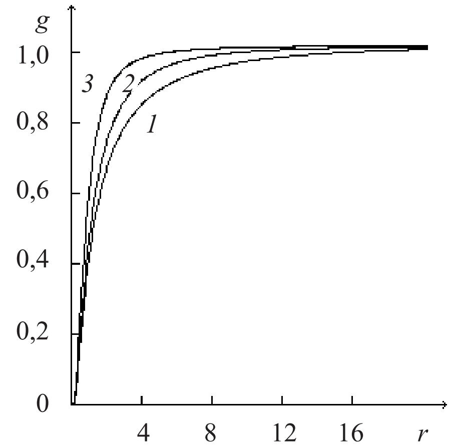

Рис. 4. Радиальная функция распределения при различных плотностях:
1 – ρ = 0,001; *2* – ρ = 0,01; *3* – ρ = 0,1

На рис. 4 представлены радиальные функции при различных плотностях.

Заключение. В нелинейном интегральном уравнении для простой жидкости путем эквивалентного преобразования устранены потенциальные расходимости, характерные для систем заряженных частиц.

Литература

1. Боголюбов, Н. Н. Избранные труды: в 3 т. / Н. Н. Боголюбов. – Киев: Наукова думка, 1970. – Т. 2. – 520 с.

2. Майер, Дж. Статистическая механика / Дж. Майер, М. Гепперт-Майер. – М.: Мир, 1980. – 544 с.

3. Зубарев, Д. Н. Вычисление конфигурационных интегралов для систем частиц с кулоновским взаимодействием / Д. Н. Зубарев // Докл. акад. наук СССР. – 1954. – Т. XCV, № 4. – С. 757–760.

4. Юхновский, И. Р. Статистическая теория классических равновесных систем / И. Р. Юхновский, М. Ф. Головко. – Киев: Наукова думка, 1980. – 372 с.

5. Белов, В. В. Новые интегральные уравнения для простых жидкостей / В. В. Белов // Докл. акад. наук БССР. – 1988. – Т. 32, № 2. – С. 116–119.

6. Белов, В. В. Замкнутые уравнения в статистической механике жидкости / В. В. Белов // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2008. – Вып. XVI. – С. 29–31.