

§ 79. Метод корреляционных функций

Преимущество изложенного в предыдущем параграфе метода Дебая — Хюккеля состоит в его простоте и физической прозрачности. С другой стороны, его основной недостаток заключается в невозможности обобщения для вычисления следующих приближений по концентрации. Мы изложим поэтому вкратце также и другой метод (предложенный *Н. Н. Боголюбовым*, 1946), хотя и более сложный, но позволяющий в принципе вычислить также и следующие члены разложения термодинамических величин.

Этот метод основан на рассмотрении так называемых *корреляционных функций* между одновременными положениями нескольких частиц в заданных точках пространства. Простейшей и наиболее важной из них является бинарная корреляционная функция w_{ab} , пропорциональная вероятности найти одновременно две частицы (иона) в заданных точках \mathbf{r}_a и \mathbf{r}_b (оба иона a и b могут быть как одного, так и разных родов). Ввиду изотропии и однородности газа эта функция зависит, конечно, лишь от $r = |\mathbf{r}_b - \mathbf{r}_a|$. Мы выберем нормировочный коэффициент в функции w_{ab} таким образом, чтобы она стремилась к единице при $r \rightarrow \infty$.

Если функция w_{ab} известна, искомая энергия $E_{\text{кортр}}$ может быть найдена путем интегрирования по очевидной формуле¹⁾

$$E_{\text{кортр}} = \frac{1}{2V^2} \sum_{a, b} N_a N_b \iint u_{ab} w_{ab} dV_a dV_b, \quad (79,1)$$

где суммирование ведется по всем родам ионов, а u_{ab} — энергия кулоновского взаимодействия пары ионов на расстоянии r .

Согласно формуле распределения Гиббса функция w_{ab} дается следующим выражением:

$$w_{ab} = \frac{1}{V^{N-2}} \int \exp \left\{ \frac{F - F_{\text{ид}} - U}{T} \right\} dV_1 dV_2 \dots dV_{N-2}, \quad (79,2)$$

где U — энергия кулоновского взаимодействия всех ионов, а интегрирование производится по координатам всех ионов, за исключением двух данных ионов. Для приближенного вычисления этого интеграла воспользуемся следующим приемом.

Дифференцируем равенство (79,2) по координатам иона b :

$$\frac{\partial w_{ab}}{\partial \mathbf{r}_b} = -\frac{w_{ab}}{T} \frac{\partial u_{ab}}{\partial \mathbf{r}_b} - \frac{1}{VT} \sum_c N_c \int \frac{\partial u_{bc}}{\partial \mathbf{r}_b} w_{abc} dV_c, \quad (79,3)$$

¹⁾ Сама по себе эта формула не связана, конечно, с кулоновским характером взаимодействия частиц и предполагает лишь его парность.

где суммирование в последнем члене производится по всем родам ионов, а ω_{abc} — тройная функция корреляции, определенная согласно

$$\omega_{abc} = \frac{1}{V^{N-3}} \int \exp \left\{ \frac{F - |F_{\text{ил}} - U}{T} \right\} dV_1 dV_2 \dots dV_{N-3}$$

по аналогии с (79,2).

Предполагая газ достаточно разреженным и рассматривая лишь члены первого порядка, можно выразить функцию тройной корреляции через бинарные корреляции. Действительно, пренебрегая возможностью всем трем ионам находиться вблизи друг друга, имеем

$$\omega_{abc} = \omega_{ab} \omega_{bc} \omega_{ac}.$$

В том же приближении мы можем считать, что даже пары частиц не находятся настолько близко друг к другу, чтобы ω_{ab} существенно отличались от единицы. Вводя малые величины

$$\omega_{ab} = \omega_{ab} - 1 \quad (79,4)$$

и пренебрегая их высшими степенями, можем написать:

$$\omega_{abc} = \omega_{ab} + \omega_{bc} + \omega_{ac} + 1. \quad (79,5)$$

При подстановке этого выражения в интеграл в правой стороне (79,3) остается только член с ω_{ac} ; остальные обращаются тождественно в нуль в силу изотропии газа. В первом члене справа в (79,3) достаточно положить $\omega_{ab} = 1$. Таким образом,

$$\frac{\partial \omega_{ab}}{\partial r_b} = -\frac{1}{T} \frac{\partial u_{ab}}{\partial r_b} - \frac{1}{TV} \sum_c N_c \int \omega_{ac} \frac{\partial u_{bc}}{\partial r_b} dV_c.$$

Возьмем теперь дивергенцию от обеих сторон этого равенства, помня, что

$$u_{ab} = \frac{z_a z_b e^2}{r}, \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_b - \mathbf{r}_a,$$

и учитывая известную формулу

$$\Delta \frac{1}{r} = -4\pi \delta(\mathbf{r}).$$

После этого интегрирование становится тривиальным ввиду наличия δ -функции, и мы получаем

$$\Delta \omega_{ab}(\mathbf{r}) = \frac{4\pi z_a z_b e^2}{T} \delta(\mathbf{r}) + \frac{4\pi e^2 z_b}{TV} \sum_c N_c z_c \omega_{ac}(\mathbf{r}). \quad (79,6)$$

Решение этой системы уравнений можно искать в виде

$$\omega_{ab}(\mathbf{r}) = z_a z_b \omega(\mathbf{r}), \quad (79,7)$$

в результате чего система сводится к одному уравнению

$$\Delta\omega(\mathbf{r}) - \kappa^2\omega(\mathbf{r}) = \frac{4\pi e^2}{T} \delta(\mathbf{r}). \quad (79,8)$$

Это окончательное уравнение имеет ту же форму, что и уравнение (78,7) в методе Дебая — Хюккеля (член с δ -функцией в (79,8) соответствует граничному условию при $r \rightarrow 0$, накладываемому на функцию $\varphi(r)$ в (78,7)). Решение уравнения (79,8):

$$\omega(r) = -\frac{e^2}{T} \frac{e^{-\kappa r}}{r}, \quad (79,9)$$

чем и определяются бинарные корреляционные функции в плазме.

Для вычисления энергии достаточно подставить теперь ω_{ab} из (79,4), (79,7), (79,9) в (79,1). Переходя к интегрированию по относительным координатам двух частиц, находим

$$E_{\text{корр}} = -\frac{V}{2} \sum_{a,b} n_a n_b \int_0^{\infty} \frac{z_a z_b e^2}{r} \frac{z_a z_b e^2}{Tr} e^{-\kappa r} 4\pi r^2 dr$$

(член 1 в ω_{ab} не дает вклада в энергию в силу условия электрической нейтральности плазмы). Произведя интегрирование, вернемся к прежнему результату (78,11).

В следующем приближении вычисления становятся более громоздкими. В частности, предположение (79,5) теперь недостаточно, и следует ввести тройные корреляции, не сводящиеся уже к бинарным. Для них получается уравнение, аналогичное (79,3), содержащее теперь четверные корреляции, которые, однако, в данном (втором) приближении сводятся к тройным¹⁾.

§ 80. Термодинамические величины вырожденной плазмы

В изложенной в § 78 теории предполагалось, что плазма далека от вырождения, т. е. подчиняется статистике Больцмана. Рассмотрим теперь ситуацию, когда температура плазмы настолько низка, что ее электронная компонента уже вырождена:

$$T \ll \frac{\hbar^2}{m} n^{2/3}, \quad (80,1)$$

где m — масса электрона (ср. (57,8)); при этом ионная компонента благодаря большой массе ионов может быть еще далека от вырождения.

¹⁾ Члены следующего порядка в термодинамических величинах плазмы фактически вычислены (другим методом) А. А. Веденовым и А. И. Ларкиным, ЖЭТФ 36, 1133 (1959).