Письма в ЖЭТФ, том 15, вып. 8, стр. 495 – 497 20 апреля 1972 г.

ИНТЕГРАЛЬНОЕ УРАВНЕНИЕ ДЛЯ ПАРНОЙ КОРРЕЛЯЦИОННОЙ ФУНКЦИИ ПЛОТНЫХ ГАЗОВ И ПЛАЗМЫ

Ю. Л. Климонтович

Основной задачей равновесной статистической теории плотных газов и плазмы является определение парной корреляционной функции [1–3]. Один из возможных способов решения этой задачи сводится к решению приближенных интегральных уравнений для корреляционной функции $g_2 = f_2 - 1$. f_2 – парная функция распределения.

В настоящее время используются три таких уравнения, соответствующих различным приближениям [4, 5]. Это уравнение Кирквуда, Боголюбова, Борна – Грина, в котором для функции распределения используется суперпозиционное приближение, уравнение Перкуса – Йевика и так называемое уравнение сверхпереплетающихся цепей. Используются также усложненные варианты последних двух уравнений [4, 5].

Для плотных газов и жидкостей наилучшим является уравнение Перкуса – Йевика. Для плазмы лучшее приближение дает уравнение сверхпереплетающихся цепей.

Метод обоснования этих приближений, основанный на функциональном разложении по малой неоднородности, к сожалению, слишком формален и не вскрывает физической сущности предположений, которые делаются при выводе уравнений.

В настоящей работе предлагаются другие интегральные уравнения для корреляционных функций плотных газов и плазмы, физический смысл которых более прозрачен.

Представим равновесное выражение для парной функции распределения в виде

$$f_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = e^{-(\phi_{12}/kT)} F(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2); \quad \frac{1}{V^2} \int f_2 \, d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 = 1.$$

Здесь введена функция

$$F = \frac{V^2}{Z} \int \exp\left[- \frac{\sum\limits_{3 \leqslant j \leqslant N} (\phi_{1j} + \phi_{2j}) + \sum\limits_{3 \leqslant i < j \leqslant w} \phi_{ij}}{kT} \right] d\mathbf{r}_3 \ldots d\mathbf{r}_N$$

Z – статистический интеграл, V – объем.

Функция $F \to 1$, когда расстояния $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_j|, |\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_j| \to \infty$ при всех значениях j, т. е. когда корреляции частиц 1, 2 с окружающими частицами стремятся к нулю.

Представим функцию $F - 1$ в виде ряда по корреляционным функциям и возрастающим степеням плотности. Ряд должен иметь такую структуру, чтобы при замене функции g_2 на ее значение в нулевом приближении по плотности $\left(g_2^\circ = \exp\left(-\frac{\phi_{12}}{kT}\right) - 1\right)$ выражение для f_2 совпадало бы с соответствующим вириальным разложением по плотности.

В первом приближении по плотности имеем

$$f_2(1, 2) \equiv g_2(1, 2) + 1 = e^{-(\phi_{12}/kT)}\left(1 + n\int g_2(1, 3) g_2(2, 3)\, d\mathbf{r}_3\right). \quad (1)$$

При замене в (1) g_2 на g_2° выражение (1) для f_2 дает первые два члена разложения по плотности и, следовательно, определяет первые три члена в вириальных разложениях термодинамических функций,

Запишем для сравнения в принятых обозначениях уравнение Перкуса – Йевика

$$f_2(1, 2) = e^{-(\phi_{12}/kT)}\left(1 + n\int e^{(\phi_{13}/kT)} f_2(1, 3) g_2^\circ(1, 3) g_2(2, 3)\, d\mathbf{r}_3\right). \quad (2)$$

Уравнение (2) переходит в (1) при замене $g_2^\circ(1, 3) \to g^2$,

$$f_2(1, 3) \to f_2^\circ = \exp\left(-\frac{\phi_{13}}{kT}\right).$$

Уравнение (1) имеет структуру, близкую к (2) но более симметрично. Интерпретация уравнения (1) более проста. Оно учитывает корреляции окружающих частиц с выделенными частицами 1, 2 в самосогласованном приближении по корреляционным функциям.

При записи соответствующих уравнений для плазмы в уравнении для g_{ab} надо учесть вклад динамической поляризации. В работе [6] показано, что усредненный вклад динамической поляризации может быть учтен путем введения эффективного потенциала $\tilde{\phi}_{ab}$ в уравнение для g_{ab}. В равновесном состоянии

$$\tilde{\phi}_{ab}(r) = \frac{e_a e_b}{r} e^{-r/r_d},$$

т. е. совпадают с дебаевским потенциалом.

Уравнение для g_{ab} тогда принимает вид

$$f_{ab}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b) = e^{-(\tilde{\phi}_{ab}/kT)}\left(1 + \sum_c n_c \int g_{ac}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_c) g_{bc}(\mathbf{r}_b\ \mathbf{r}_c)\, d\mathbf{r}_c\right) \quad (3)$$

a, b, c – индексы компонент-плазмы.

В нулевом приближении по плотности и при $\tilde{\Phi}_{ab}/kT << 1$ выражение (3) приводит к правильному результату и в первом приближении по плазменному параметру.

Московский
государственный университет
им. М.В. Ломоносова

Поступила в редакцию
9 марта 1972 г.

Литература

[1] Н.Н.Боголюбов. Проблемы динамической теории в статистической физике. М.-Л., ОГИЗ, Гостехиздат 1946. Избранные труды т. II. Наукова думка, Киев, 1970.

[2] И.З.Фишер. Статистическая теория жидкостей. Физматгиз 1961.

[3] Л.Д.Ландау, И.М.Лифшиц. Статистическая физика. Изд. Наука, 1964.

[4] Физика простых жидкостей (сб. статей), Изд. Мир, 1971.

[5] Н.П.Коноваленко, И.З.Фишер. УФН, **108**, вып. 2, 1972.

[6] Ю.Л.Климонтович. ЖЭТФ, **62**, вып. 5, 1972.