

УДК 533.9

А. Е. ДАВЛЕТОВ

ПРИБЛИЖЕНИЕ ПАРНЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ КАК МЕТОД РАСЩЕПЛЕНИЯ ЦЕПОЧКИ УРАВНЕНИЙ БОГОЛЮБОВА ДЛЯ РАВНОВЕСНЫХ ФУНКЦИЙ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

Из цепочки уравнений Боголюбова для равновесных функций распределения выведено обобщенное уравнение Больцмана–Пуассона, позволяющее построить целый ряд моделей взаимодействия частиц плазменной среды.

Макроскопические системы, широко встречающиеся как в повседневной жизни, так и в научных исследованиях, состоят из огромного числа частиц, ввиду чего попытки их механистического описания путем определения координат и импульсов всех частиц заранее обречены на неудачу. В связи с этим, с одной стороны, Гибсом [1] был разработан статистический метод исследования, основанный на введении понятия вероятности и рассмотрении совокупности одинаково приготовленных систем – ансамблей, а его задача заключается в изучении распределения этих систем между возможными микросостояниями. С другой стороны, Больцманом и Максвеллом был феноменологически развит кинетический подход к описанию макроскопических систем, нашедший затем свое обоснование в работах Боголюбова [2, 3]. На основе уравнения Лиувилля им была предложена цепочка уравнений для частичных функций распределения, которая совместно с условием ослабления корреляций позволяет регулярным способом получить все известные кинетические уравнения.

Цепочка уравнений Боголюбова для равновесных функций распределения

Известно, что функция распределения в фазовом пространстве координат \mathbf{r}_i и импульсов \mathbf{p}_i для канонического ансамбля имеет вид

$$f_N^{(0)} = \frac{1}{h^{3N} N! Z} \exp\left(-\frac{H}{\theta}\right), \quad (1)$$

где N – число частиц в системе; $\theta = k_B T$, k_B – постоянная Больцмана; T – температура; H –

функция Гамильтона системы; а статистический интеграл Z записывается как

$$Z = \frac{1}{h^{3N} N!} \int \exp\left(-\frac{H}{\theta}\right) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{p}_1 \dots d\mathbf{r}_N d\mathbf{p}_N. \quad (2)$$

При этом гамильтониан H системы может быть представлен выражением

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m_i} + \varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{K}, \mathbf{r}_N), \quad (3)$$

а потенциальная энергия взаимодействия $\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{K}, \mathbf{r}_N)$ – суммой попарных взаимодействий:

$$\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{K}, \mathbf{r}_N) = \frac{1}{2} \sum'_{i,j} \varphi_{ij}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|). \quad (4)$$

Здесь m_i – масса i -й частицы, а $\varphi_{ij}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$ – потенциальная энергия взаимодействия между i -й и j -й частицами. Штрих у знака суммы в формуле (4) означает, что суммирование ведется по всем возможным парам, за исключением $i = j$.

Из выражений (1) и (3) следует, что

$$f_N^{(0)} \sim \left[\prod_i \exp\left(-\frac{p_i^2}{2m_i\theta}\right) \right] \exp\left(-\frac{\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{K}, \mathbf{r}_N)}{\theta}\right), \quad (5)$$

т. е. в состоянии теплового равновесия корреляции между пространством импульсов и конфигурационным пространством отсутствуют. Это является следствием того, что потенциальная энергия системы не зависит от импульсов частиц, поэтому распределения в координатном и импульсном пространствах можно рассматри-

вать независимо друг от друга.

Для рассмотрения корреляций в конфигурационном пространстве в соответствии с (4) и (5) введем нормированную функцию распределения

$$P_N(\mathbf{r}_1, \mathbf{K}, \mathbf{r}_N) = \frac{\exp\left(-\frac{1}{2\theta} \sum'_{i,j} \varphi_{ij}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)\right)}{\int \exp\left(-\frac{1}{2\theta} \sum'_{i,j} \varphi_{ij}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)\right) d\mathbf{r}_1 \mathbf{K} d\mathbf{r}_N}.$$

(6)

При этом в импульсном пространстве имеет место обычное распределение Максвелла по скоростям.

Описание состояния системы с помощью функции распределения (6) несет в себе слишком подробную информацию. Поэтому определим частную молекулярную функцию распределения (ЧМРФ) более низкого порядка как

$$P_s(\mathbf{r}_1, \mathbf{K}, \mathbf{r}_s) = \int P_N(\mathbf{r}_1, \mathbf{K}, \mathbf{r}_N) d\mathbf{r}_{s+1} \mathbf{K} d\mathbf{r}_N. \quad (7)$$

Пусть s -конфигурация – произвольное распределение s частиц в координатном пространстве. Тогда в соответствии с выражением (7) ЧМРФ порядка s определяет плотность вероятности того, что s различных частиц имеют координаты $\mathbf{r}_1, \mathbf{K}, \mathbf{r}_s$.

Обозначим сорта частиц латинскими буквами a, b, c, \dots , а номера частиц – i, j, k, \dots и будем рассматривать общую молекулярную функцию распределения (ОМРФ) P^s порядка s , определяющую плотность вероятности того, что s частиц характеризуются набором координат ${}^a \mathbf{r}_1, \mathbf{K}, {}^a \mathbf{r}_{v_a}, \mathbf{K}, {}^d \mathbf{r}_1, \mathbf{K}, {}^d \mathbf{r}_{v_d}$. Здесь v_f означает число частиц сорта f , содержащихся в данной s -конфигурации, а различием частиц одного сорта в пределах каждой группы v_f полностью пренебрегаем. Очевидно, что имеет место следующее соотношение:

$$\sum_f v_f = s. \quad (8)$$

Пусть N_f – полное число частиц сорта f в сис-

теме, а \mathbf{r}_i – координаты i -й частицы сорта f в данной конфигурации. Тогда из известных формул комбинаторики следует, что общая P^s и частная P_s молекулярные функции распределения могут быть связаны соотношением

$$P^s({}^a \mathbf{r}_1, \mathbf{K}, {}^a \mathbf{r}_{v_a}, \mathbf{K}, {}^d \mathbf{r}_1, \mathbf{K}, {}^d \mathbf{r}_{v_d}) = \prod_f \frac{N_f!}{(N_f - v_f)!} P_s(\mathbf{r}_1, \mathbf{K}, \mathbf{r}_s). \quad (9)$$

Для получения цепочки уравнений Боголюбова, вычислим градиент ∇_i от ЧМРФ P_s по координате i -й частицы [см. формулы (6) и (7)]:

$$\nabla_i P_s = -\frac{1}{\theta h^3 N! Z} \int \exp\left(-\frac{\varphi}{\theta}\right) \sum'_{j=1}^N \nabla_i \varphi_{ij} d\mathbf{r}_{s+1} \mathbf{K} d\mathbf{r}_N. \quad (10)$$

Разобьем сумму в соотношении (10) на две части:

$$\sum'_{j=1}^N = \sum'_{j=1}^s + \sum'_{k=s+1}^N. \quad (11)$$

При этом первая из них представляет собой сумму по всем частицам данной s -конфигурации, а вторая – по всем остальным частицам. В итоге получаем уравнение

$$\nabla_i P_s(\mathbf{r}_1, \mathbf{K}, \mathbf{r}_s) = -\frac{1}{\theta} \sum'_{j=1}^s (\nabla_i \varphi_{ij}) P_s(\mathbf{r}_1, \mathbf{K}, \mathbf{r}_s) - \frac{1}{\theta} \sum'_{k=s+1}^N \int (\nabla_i \varphi_{ik}) P_{s+1}(\mathbf{r}_1, \mathbf{K}, \mathbf{r}_s, \mathbf{r}_k) d\mathbf{r}_k, \quad (12)$$

которое после деления на P_s и умножения на θ принимает вид

$$\theta \nabla_i \ln P_s(\mathbf{r}_1, \mathbf{K}, \mathbf{r}_s) = -\sum'_{j=1}^s (\nabla_i \varphi_{ij}) - \sum'_{k=s+1}^N \int (\nabla_i \varphi_{ik}) \frac{P_{s+1}(\mathbf{r}_1, \mathbf{K}, \mathbf{r}_s, \mathbf{r}_k)}{P_s(\mathbf{r}_1, \mathbf{K}, \mathbf{r}_s)} d\mathbf{r}_k. \quad (13)$$

Соотношение (13) и есть цепочка уравнений Боголюбова для ЧМРФ.

Цепочка уравнений Боголюбова для ОМРФ получается из формулы (13) подстановкой в него (9). Пренебрегая при этом различием частиц в пределах каждой группы одного сорта, получаем

$$\begin{aligned} & \theta \nabla_i \ln P_s(\mathbf{r}_1, \mathbf{K}, \mathbf{r}_s) - \sum_{j=1}^s (\nabla_i \varphi_{ij}) - \\ & - \sum_c (N_c - \nu_c) \int (\nabla_i \varphi_{ik}) \frac{P_{s+1}(\mathbf{r}_1, \mathbf{K}, \mathbf{r}_s, {}^c \mathbf{r}_k)}{P_s(\mathbf{r}_1, \mathbf{K}, \mathbf{r}_s)} d^c \mathbf{r}_k. \end{aligned} \quad (14)$$

Индекс c означает, что суммирование производится по всем сортам частиц. С учетом соотношения

$$\begin{aligned} \frac{P_{s+1}(\mathbf{r}_1, \mathbf{K}, \mathbf{r}_s, \mathbf{r}_k)}{P_s(\mathbf{r}_1, \mathbf{K}, \mathbf{r}_s)} &= \frac{(N_c - \nu_c - 1)! P^{s+1}}{(N_c - \nu_c)! P^s} = \\ &= \frac{1}{(N_c - \nu_c)} \frac{P^{s+1}({}^a \mathbf{r}_1, \mathbf{K}, {}^d \mathbf{r}_{\nu_d}, {}^c \mathbf{r}_k)}{P^s({}^a \mathbf{r}_1, \mathbf{K}, {}^d \mathbf{r}_{\nu_d})} \end{aligned} \quad (15)$$

получаем цепочку уравнений для ОМРФ

$$\begin{aligned} & \theta \nabla_i \ln P^s({}^a \mathbf{r}_1, \mathbf{K}, {}^d \mathbf{r}_{\nu_d}) - \sum_{j=1}^s (\nabla_i \varphi_{ij}) - \\ & - \sum_c \int (\nabla_i \varphi_{ik}) \frac{P^{s+1}({}^a \mathbf{r}_1, \mathbf{K}, {}^d \mathbf{r}_{\nu_d}, {}^c \mathbf{r}_k)}{P^s({}^a \mathbf{r}_1, \mathbf{K}, {}^d \mathbf{r}_{\nu_d})} d^c \mathbf{r}_k. \end{aligned} \quad (16)$$

Приближение парных корреляций

Для дальнейшего нам понадобится физическая трактовка цепочки уравнений Боголюбова (13), правая часть которой состоит из двух частей. Первый член представляет собой силу, действующую на i -ю частицу со стороны частиц данной s -конфигурации, а второй – среднюю силу, действующую со стороны всех остальных частиц системы. Таким образом правая часть (13) является силой, действующей на i -ю частицу со стороны всей системы.

В соответствии с этим введем среднюю энергию i -й частицы в s -конфигурации в виде

$$\langle \varphi_i^s \rangle = \sum_{i,j=1}^s \varphi_{ij}^s + \sum_{k=s+1}^N \int \varphi_{ik} \frac{P_{s+1}(\mathbf{r}_1, \mathbf{K}, \mathbf{r}_s, \mathbf{r}_k)}{P_s(\mathbf{r}_1, \mathbf{K}, \mathbf{r}_s)} d\mathbf{r}_k. \quad (17)$$

Поддействовав оператором ∇_i на уравнение (17) и сложив с (13), получим

$$\begin{aligned} & \theta \nabla_i \ln P_s(\mathbf{r}_1, \mathbf{K}, \mathbf{r}_s) + \nabla_i \langle \varphi_i^s \rangle = \\ & \sum_{k=s+1}^N \int \varphi_{ik}^s \nabla_i \frac{P_{s+1}(\mathbf{r}_1, \mathbf{K}, \mathbf{r}_s, \mathbf{r}_k)}{P_s(\mathbf{r}_1, \mathbf{K}, \mathbf{r}_s)} d\mathbf{r}_k. \end{aligned} \quad (18)$$

Перейдем к рассмотрению приближения парных корреляций. Выражение для ЧМРФ порядка s может быть записано в виде

$$P_s(\mathbf{r}_1, \mathbf{K}, \mathbf{r}_s) = \prod_{i=1}^s P_1(\mathbf{r}_i) \prod_{k(2)} (1 + {}^s g_{ij}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)) \Theta$$

$$\Theta \prod_{k(3)} (1 + {}^s g_{ijk}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k)) \prod_{k(4)} \dots \quad (19)$$

Величины ${}^s g_{ijk}$ представляют собой корреляционные функции системы s частиц. При этом их порядок определяется числом индексов, совпадающих с индексами коррелирующих частиц. Символ $k(q)$ показывает, что произведение следует брать по всем возможным комбинациям индексов порядка q . Для однородной системы величины $P_1(\mathbf{r}_i) = 1/V$ представляют константы, не зависящие ни от сорта частиц, ни от их координат, а только от объема системы V .

В приближении парных корреляций выбрасываются все корреляционные функции выше второго порядка, а также их произведения. Тогда отношение ЧМРФ порядка $s+1$ к ЧМРФ порядка s определяется выражением

$$\begin{aligned} \frac{P_{s+1}(\mathbf{r}_1, \mathbf{K}, \mathbf{r}_s, \mathbf{r}_k)}{P_s(\mathbf{r}_1, \mathbf{K}, \mathbf{r}_s)} &= P_1(\mathbf{r}_k) \prod_{i=1}^s (1 + {}^s g_{ik}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_k)) \\ & P_1(\mathbf{r}_k) (1 + \sum_{i=1}^s {}^s g_{ik}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_k)). \end{aligned} \quad (20)$$

Подстановка уравнения (20) в (18) дает

$$\begin{aligned} & \theta \nabla_i \ln P_s(\mathbf{r}_1, \mathbf{K}, \mathbf{r}_s) + \nabla_i \langle \varphi_i^s \rangle = \\ & \sum_{k=s+1}^N \int \varphi_{ik}^s \nabla_i {}^s g_{ik}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_k) d\mathbf{r}_k. \end{aligned} \quad (21)$$

Известно, что в термодинамическом пределе корреляционные функции зависят только от взаимных расстояний между частицами, т. е. ${}^s g_{ik}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_k) = {}^s g_{ik}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_k|)$, поэтому интеграл в правой части (21) равен нулю вследствие сферической симметрии. Таким образом,

$$\theta \nabla_i \ln P_s(\mathbf{r}_1, \mathbf{K}, \mathbf{r}_s) + \nabla_i \langle \varphi_i^s \rangle = 0. \quad (22)$$

Рассмотрим эффективное взаимодействие двух частиц в конфигурации с $s=2$, т. е. положим

$$\langle \varphi_i^2 \rangle = \Phi_{ab}({}^a \mathbf{r}_i, {}^b \mathbf{r}_j). \quad (23)$$

Тогда из (22) и (19) в приближении парных корреляций получим

$$\begin{aligned} & P_2({}^a \mathbf{r}_i, {}^b \mathbf{r}_j) = P_1({}^a \mathbf{r}_i) P_1({}^b \mathbf{r}_j) (1 + {}^2 g_{ij}({}^a \mathbf{r}_i, {}^b \mathbf{r}_j)) \\ & A \exp\left(-\frac{\Phi_{ab}({}^a \mathbf{r}_i, {}^b \mathbf{r}_j)}{\theta}\right), \end{aligned} \quad (24)$$

где $A = 1/V^2$ – постоянная интегрирования, определяемая из условия нормировки (6) и (7). Из

(24) нетрудно найти, что

$${}^2g_{ij}(\mathbf{a}\mathbf{r}_i, \mathbf{b}\mathbf{r}_j) = \exp\left(-\frac{\Phi_{ab}(\mathbf{a}\mathbf{r}_i, \mathbf{b}\mathbf{r}_j)}{\theta}\right) - 1. \quad (25)$$

После подстановки (20) и (22) в цепочку уравнений Боголюбова (14) с использованием (23) и (25) получим

$$\nabla_i \Phi_{ab}(\mathbf{a}\mathbf{r}_i, \mathbf{b}\mathbf{r}_j) = \nabla_i \varphi_{ac}(\mathbf{a}\mathbf{r}_i, \mathbf{b}\mathbf{r}_j) + \sum_c \frac{(N_c - \nu_c)}{V} \theta \oint \nabla_i \varphi_{ac}(\mathbf{a}\mathbf{r}_i, \mathbf{c}\mathbf{r}_k) \exp\left(-\frac{\Phi_{cb}(\mathbf{c}\mathbf{r}_k, \mathbf{b}\mathbf{r}_j)}{\theta}\right) d^c \mathbf{r}_k. \quad (26)$$

Переходя к термодинамическому пределу $N_c \rightarrow \infty$, $V \rightarrow \infty$, $n_c = N_c/V = const$ – концентрация частиц сорта c , и линеаризуя экспоненту в (26), окончательно получаем

$$\nabla_i \Phi_{ab}(\mathbf{a}\mathbf{r}_i, \mathbf{b}\mathbf{r}_j) = \nabla_i \varphi_{ab}(\mathbf{a}\mathbf{r}_i, \mathbf{b}\mathbf{r}_j) - \sum_c \frac{n_c}{k_B T} \int \nabla_i \varphi_{ac}(\mathbf{a}\mathbf{r}_i, \mathbf{c}\mathbf{r}_k) \Phi_{cb}(\mathbf{c}\mathbf{r}_k, \mathbf{b}\mathbf{r}_j) d^c \mathbf{r}_k. \quad (27)$$

Аналогичная линеаризация экспоненты должна быть проведена в (25)

$${}^2g_{ij}(\mathbf{a}\mathbf{r}_i, \mathbf{b}\mathbf{r}_j) = -\frac{\Phi_{ab}(\mathbf{a}\mathbf{r}_i, \mathbf{b}\mathbf{r}_j)}{k_B T}. \quad (28)$$

После воздействия оператором ∇_i на уравнение (27) получаем так называемое обобщенное уравнение Больцмана–Пуассона

$$\Delta_i \Phi_{ab}(\mathbf{a}\mathbf{r}_i, \mathbf{b}\mathbf{r}_j) = \Delta_i \varphi_{ab}(\mathbf{a}\mathbf{r}_i, \mathbf{b}\mathbf{r}_j) - \sum_c \frac{n_c}{k_B T} \int \Delta_i \varphi_{ac}(\mathbf{a}\mathbf{r}_i, \mathbf{c}\mathbf{r}_k) \Phi_{cb}(\mathbf{c}\mathbf{r}_k, \mathbf{b}\mathbf{r}_j) d^c \mathbf{r}_k. \quad (29)$$

Уравнение (29) представляет собой систему интегро-дифференциальных уравнений для определения эффективных потенциалов взаимодействия (макропотенциалов) $\Phi_{ab}(\mathbf{a}\mathbf{r}_i, \mathbf{b}\mathbf{r}_j)$ двух частиц с учетом наличия среды через микропотенциалы взаимодействия $\varphi_{ab}(\mathbf{a}\mathbf{r}_i, \mathbf{b}\mathbf{r}_j)$. На его основе был построен целый ряд так называемых псевдопотенциальных моделей, принимающий во внимание коллективный характер взаимодействия частиц плазменной среды. В частности, в [4, 5] была предложена модель взаимодействия частиц квазиклассической двухкомпонентной плазмы, учитывающая как квантовые эффекты дифракции и симметрии, так и экранировку поля зарядов. Это позволило решить проблему расхо-

димости классического интеграла столкновений по прицельным параметрам без использования так называемой процедуры «обрезания» [6]. Помимо этого соотношения (27) и (28) позволили построить так называемую самосогласованную химическую модель водородной плазмы [7–10], корректно учитывающую вклад взаимодействий между частицами в выражение для свободной энергии системы, что в свою очередь, дало возможность изучить как термодинамические, так и транспортные свойства.

Таким образом, в данной работе исходя из цепочки уравнений Боголюбова для равновесных функций распределения в приближении парных корреляций получено уравнение, связывающее поведение макропотенциала, учитывающего коллективные явления, с микропотенциалом взаимодействия частиц. В отличие от [11] вывод не содержит математических неточностей и вполне корректен.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. М.: Физматлит, 2002. Т. 1, 2.
2. Боголюбов Н.Н. Проблемы динамической теории в статистической физике. М.: Гостехиздат, 1946.
3. Боголюбов Н.Н. Избранные труды. Киев: Наукова думка, 1970. Т. 1, 2.
4. Arkhipov Yu.V., Baimbetov F.B., Davletov A.E. // The European Physical Journal D. 2000. V. 8. P. 299.
5. Arkhipov Yu.V., Baimbetov F.B., Davletov A.E. // Journal of Physics IV France, 2000. V. 10. P. 135.
6. Baimbetov F.B., Davletov A.E., Ismukhamedov T.K. // PPPT-6 Conference. Minsk, 2006. P. 169.
7. Arkhipov Yu.V., Baimbetov F.B., Davletov A.E. // Contributions to Plasma Physics. 2003. V. 43. P. 258.
8. Arkhipov Yu.V., Baimbetov F.B., Davletov A.E. // Czechoslovak Journal of Physics. 2004. V. 56. P. 492.
9. Arkhipov Yu.V., Baimbetov F.B., Davletov A.E. // Physics of Plasmas. 2005. V. 12. P. 082701.
10. Arkhipov Yu.V., Baimbetov F.B., Davletov A.E. // Contributions to Plasma Physics, 2007. PNP-12 Conference Proceedings, accepted for publication.
11. Эккер Г. Теория полностью ионизированной плазмы. М.: Мир, 1974.

Резюме

Плазмалық ортадағы көптеген бөлшектердің әрекеттесу модельдерін құруға мүмкіндік беретін, тепе-теңдік тараулы функциясы үшін Боголюбов теңдеу тізбегінен жинақтандырылған Больцман-Пуассон теңдеуі шығарылған.

Summary

Starting from the Bogolyubov equation for equilibrium distribution functions a generalized Boltzmann-Poisson equation is derived allowing one to construct a number of particles interaction models for plasma like systems.

НИИ ЭТФ КазНУ им. аль-Фараби,
г. Алматы

Поступила 17.04.07г.