

Расчет вклада микрополя ионов в термодинамику плотной, разогретой плазмы и тестирование функций распределения ионного микрополя на этой основе.

А.С.Борисов, Москва,

basifto@mail.ru, basifto@gmail.com, +79161475554м.т.

В связи с работами, проводимыми по управляемому термоядерному синтезу, плотная, сильно разогретая плазма долгие годы усиленно изучается. Изучаются как причины возникновения гидродинамических неустойчивостей, так и внутренние свойства плазмы, включая расчет уравнения состояния вещества в экстремальном состоянии сильного сжатия и разогрева. В последние десятилетия рассматриваются аргументы о том, что при расчетах уравнений состояния вещества в подобных условиях необходимо учитывать фактор ионного микрополя для правильного понимания вклада ядерной компоненты в термодинамические свойства плазмы [1-2]. При этом аргументами, подтверждающими такие выводы, являются оптические измерения [3].

Данная заметка иллюстрирует интересный факт того, что расчет вклада ядер в термодинамику через непосредственное введение функции распределения ионного микрополя в свободную энергию системы согласуется с результатами компьютерных расчетов такого вклада методом молекулярной динамики в пределе сильной неидеальности. Показано, что если результаты компьютерного моделирования принять за эталон, то вклад ядер в термодинамику выражается через функцию распределения вероятности флуктуаций ионного микрополя.

Сравнивая результаты этих двух подходов, оказывается возможным протестировать широко применяемые модели ионного микрополя. В результате проведенного тестирования оказалось, что гауссово распределение (а совсем не общепринятое распределение Хольцмарка) наиболее точно воспроизводит твердотельный предел молекулярно-динамических расчетов, что согласуется с ранее высказанными идеями в [3].

1.Введение. В последние три десятилетия одной из групп, занимающейся разработкой моделей для описания плотной неидеальной плазмы и созданием программ расчетов широкодиапазонных уравнений состояния веществ (включая экстремальные состояния при сверхвысоких давлениях и температурах) было выдвинуто предположение о важной роли ионного микрополя при проведении таких расчетов [1]. Влияние микрополя ионов изучалось посредством обрезания статистических сумм через введение микрополевого форм-фактора и учетом на этой основе дополнительных поправок на неидеальность сильно сжатого и ионизованного вещества [2]. При этом тестировались и сами существующие модели ионного микрополя. В частности, был сделан вывод о том, что в плотной, сильно разогретой плазме количество видимых водородоподобных линий лаймановской серии многократно ионизованных ионов лучше всего описывается не общепринятым распределением Хольцмарка (или моделью ближайшего соседа), а моделью более близкой к гауссовой зависимости [3]. Объяснялось это тем, что в модели Хольцмарка не важны многочастичные, межионные, кулоновские корреляции, а именно они становятся доминирующими при плотном сжатии вещества. При этом с ростом плотности в такие взаимодействия вовлекается все большее количество частиц, что изменяет характер распределения напряженности микрополя при $E \rightarrow \infty$ (или при среднем межионном расстоянии $R \rightarrow 0$) в сторону его большего соответствия условиям центральной предельной теоремы (т.е. стандартному гауссовому распределению).

В настоящей заметке представлены интересные факты, которые косвенно подтверждают выводы [3]. Оказывается, что если в термодинамические расчеты свободной энергии системы из двух сортов частиц: ионные остовы-электроны ввести

явным образом вклад микрополей от Z-кратно- ионизованных остовов, то наилучшее согласие с молекулярно-динамическими (МД) расчетами поправки на неидеальность ядерной компоненты в такой однокомпонентной неидеальной плазме обеспечивает именно гауссова форма кривой распределения ионного микрополя. При этом расчет термодинамики в твердотельном пределе ($\Gamma \rightarrow \infty$, Γ - параметр неидеальности) показывает большее расхождение с МД расчетами ($\geq 9\%$), если вместо гауссова распределения использовать общепринятое распределение Хольцмарка. Вряд ли упомянутые выше факты можно отнести к строгому доказательству гипотез, высказанных в [3]. Однако, без сомнения их можно рассматривать как косвенные, согласующиеся с [3] и опирающиеся на совершенно не связанные с оптическими измерениями данные, использованные в [3]. Именно из-за этого на них следует обратить внимание.

2.Постановка задачи. Исходные постулаты. Рассмотрим плазменную среду как совокупность частиц 2-х видов, имеющих электрические заряды противоположенного знака и в целом электронейтральную. При этом все ионы будем считать Z-кратно ионизованными. Таким образом, плазма будет рассматриваться, как однокомпонентная и число ионов в ней фиксировано. Будем считать, что электроны могут быть 2-х видов: связанные с ионным остовом и свободные, которые в силу своей малой массы создают для ионных остовов отрицательно заряженный фон.

При таком рассмотрении ясно, что дальнедействующий характер межйонных кулоновских сил на дальних расстояниях компенсируется легким и подвижным электронным фоном. При этом данная среда является не замкнутой подсистемой и взаимодействует с окружающей средой, которая поддерживает в плазме температуру T и давление P . Дальнейшая задача состоит в определении, ионной части вклада в давление, энтропию и полную энергию, т.е. в термодинамику подсистемы.

Пусть $|i\rangle$ - совокупность чистых состояний плазмы, которые отвечают энергиям плазмы как квантовой системы ϵ_i . Вводим оператор матрицы плотности, который определяет вероятность системы находиться в смешанном состоянии $|k\rangle$ со статистическим весом p_k следующими соотношениями:

$$\rho^{\wedge} = \sum_i p_i |i\rangle \langle i|, \text{ где } \sum_i p_i = Z \text{ и отсюда,}$$

$$\rho^{\wedge} |k\rangle \langle k| = \sum_i p_i |i\rangle \langle i| |k\rangle \langle k| = \sum_i p_i |i\rangle \delta_{ik} \langle k|, \quad (1)$$

Тогда из (1) следует, что если принять $p_i = e^{-\epsilon_i/T}$, то статистическая сумма $-Z$ приобретает следующий вид:

$$Z = \sum_i p_i = \sum_i e^{-\epsilon_i/T} = \sum_i e^{-\epsilon_i/T} \langle i|i\rangle = \sum_i \langle i| e^{-\epsilon_i/T} |i\rangle = \sum_i \langle i| e^{-H/T} |i\rangle = \sum_{i,k} \langle i| e^{-H/T} |k\rangle \delta_{ik} = \sum_{i,k} \langle i| e^{-H/T} |k\rangle \langle k|i\rangle = \sum_{i,k} (e^{-H/T})_{ik} \delta_{ik} = \text{Sp}((e^{-H/T})_{ik}) = \text{Sp}(\rho^{\wedge}), \quad (2)$$

что определяет матричные элементы ρ_{ik} как $\langle i | e^{-H/T} | k \rangle$. В (2) принято, что $S\rho$ - след матрицы; H -полный гамильтониан системы и, тогда, оператор матрицы плотности, соответственно,

$$\rho^{\wedge} = e^{-H/T}, \quad (3)$$

Если ввести нормировку F статистической суммы Z на единицу в системе с сохраняющимся числом частиц N , то из-за аддитивности энергии удобно определить F как ноль при отсчете уровней энергий ε_i в данной подсистеме так, что $1 = \sum_i e^{(\varepsilon_0 - \varepsilon_i)/T} = e^{\varepsilon_0/T} \cdot \sum_i e^{-\varepsilon_i/T} = e^{F/T} \cdot Z$, откуда следует,

$$F = -T \cdot \ln(Z) \quad (4)$$

и F -это свободная энергия Гемгольца, причем вводя энтропию, как среднее от логарифма вероятности со статистическими весами p_i , можно доказать строго, что $F=F(T,V)$, T - температура, V -объем [6].

Далее используем атомную систему единиц ($\hbar=e=m_e=1$). Совокупность взаимодействующих частиц- ионные остовы с зарядом Z и электроны опишем через уравнение Шредингера $H^{\wedge}\Psi(r,R)=E\Psi(r,R)$, r -пространство координат всех электронов, R -пространство координат всех ионов, $H^{\wedge}$ - полный гамильтониан. Тогда

$$H^{\wedge} = -\sum_i \Delta_{Ri}/2M_i - \sum_i \Delta_{ri}/2 + V(r,R), \text{ при } V(r,R) = 1/2 * (\sum_{i \neq j} [1/|r_i - r_j|] - Z/|r_i - R_j| + Z^2/|R_i - R_j|) \quad (5)$$

Уравнение Шредингера при таком гамильтониане строго не решается. Пользуются тем, что $M_i=M$ (для любого i), входящие в это уравнение массы ионных остовов $M \gg 1$. Это позволяет разделить в (5) переменные r и R почти строго. А именно, находят волновые функции электронов в зависимости от фиксированных положений ионов - адиабатическое приближение [12]. В нем $H^{\wedge}$ разделяют на две части

$H^{\wedge} = -\sum_i \Delta_{Ri}/2M_i + H_o^{\wedge}(r,R)$, где $H_o^{\wedge}(r,R)\phi_n(r,R) = \varepsilon_n(R) \cdot \phi_n(r,R)$, $\phi_n(r,R)$ -полный набор электронных волновых функций, таких что $\Psi(r,R) = \sum_n \Phi_n(R) \cdot \phi_n(r,R)$. Отсюда получают уравнения для ядерных волновых функций $(-\sum_i \Delta_{Ri}/2M_i + \varepsilon_n(R) - E_n) \Phi_n(R) = -\sum_i \Delta_{Ri}/2M_i \Phi_n(R) + \int dr (\phi_n(r,R)) * (\sum_i \Delta_{Ri}/2M_i \sum_s \Phi_s(R) \cdot \phi_s(r,R))$.

Правая часть этих уравнений отлична от нуля только при наличии перестройки электронной структуры в подсистеме, т.е. при описании фазовых переходов. Т.к. $\int dr (\phi_n(r,R)) * (\sum_i \Delta_{Ri}/2M_i \sum_s \Phi_s(R) \cdot \phi_s(r,R)) \approx \sum_i \Delta_{Ri}/2M_i \sum_s \Phi_s(R) \cdot \int dr (\phi_n(r,R)) * \phi_s(r,R) = \sum_i \Delta_{Ri}/2M_i \cdot \Phi_n(R)$, отсюда $(-\sum_i \Delta_{Ri}/2M_i + \varepsilon_n(R) - E_n) \Phi_n(R) = 0$. Если подсистема вдали от фазовых переходов, иными словами находится в основном состоянии термодинамического равновесия, то $\Psi(r,R) = \Phi_0(R) \cdot \phi_0(r,R)$. Тогда элементы матрицы плотности в общем случае согласно (2) равны:

$$\rho_{ik} = \langle i | e^{-H/T} | k \rangle = \langle i | \exp(-(\sum_i \Delta_{Ri}/2M_i + H_o^{\wedge}(r,R))/T) | k \rangle = \langle i | \exp(-(\sum_i \Delta_{Ri}/2M_i + 1/2 * \sum_{i \neq j} Z^2/|R_i - R_j| + H_1^{\wedge}(r,R))/T) | k \rangle = \sum_{l,s} \langle i | \exp(-(\sum_j \Delta_{Rj}/2M_j T)) | l \rangle \langle l | \exp(-1/2T * \sum_{i \neq j} Z^2/|R_i - R_j|) | s \rangle \langle s | \exp(-H_1^{\wedge}(r,R)/T) | k \rangle \approx \sum_{l,s} (\delta_{il} * (\exp(-K/T))_{il}) * (\delta_{ls} * (\exp(-\Pi/T))_{ls}) * (\delta_{sk} * (\exp(-H_1^{\wedge}(r,R)/T))_{sk}) = \delta_{ik} (\exp(-K/T))_{ik} * (\exp(-\Pi/T))_{ik} * (\exp(-H_1^{\wedge}(r,R)/T))_{ik}, \quad (5a)$$

здесь принято: $H_1^{\wedge}(r, R) = H_0^{\wedge}(r, R) - 1/2 \sum_{i \neq j} Z^2 / |R_i - R_j|$; $K = \sum_j < j | (-\Delta_{Rj} / 2M_j) | j >$ - статистическая средняя кинетическая движения ионов; $P = < k | (1/2 \sum_{i \neq j} Z^2 / |R_i - R_j|) | k >$ - статистическая средняя потенциальная энергия кулоновского взаимодействия ионных остовов между собой. При учете только основного состояния для подсистемы согласно (2) это приводит к:

$$Z = \text{Sp}(\rho^{\wedge}) = \text{Sp}(\delta_{ik}((e^{-K/T})_{ik}) * ((e^{-P/T})_{ik}) * ((e^{-H_1^{\wedge}/T})_{ik})) = \text{Sp}((e^{-K/T})_{ik} * (e^{-P/T})_{ik} * (e^{-H_1^{\wedge}/T})_{ik})|_{i=k=0} = (\text{Sp}(e^{-K/T})_{ik}) * (\text{Sp}(e^{-P/T})_{ik}) * (\text{Sp}(e^{-H_1^{\wedge}/T})_{ik})|_{i=k=0} = Z_{\text{кин}}^{\text{я}} * Z_{\text{мкп}}^{\text{я}} * Z^{\text{э}}, \quad (5b)$$

здесь принято: $Z_{\text{кин}}^{\text{я}}$ - статистическая сумма, учитывающая кинетическую энергию движения ионов; $Z_{\text{мкп}}^{\text{я}}$ - статистическая сумма для учета средней потенциальной энергии кулоновского взаимодействия ионных остовов между собой, выраженная через вклад ионного микрополя; $Z^{\text{э}}$ - статистическая сумма, учитывающая энергию взаимодействия электронов между собой и их взаимодействия с ионами.

Отсюда видно, что в этой ситуации полная статистическая сумма разбивается на сомножители, а свободная энергия согласно (4) на три аддитивных вклада:

$$F = -T * (\ln(Z_{\text{кин}}^{\text{я}}) + \ln(Z_{\text{мкп}}^{\text{я}}) + \ln(Z^{\text{э}})) \quad (6)$$

Первое слагаемое это вклад в свободную энергию от кинетической энергии движения ядер. Выражение для этой величины хорошо известно: $TN * \ln(1 / ((eV/N) * (MT/2\pi)^{3/2}))$, V-объем подсистемы. Третье слагаемое изучается с 40-х годов прошлого века со времен работы Р.Фейнмана, Н. Метрополиса, Э. Теллера [4]. Данное исследование затем в 50-60-х годах было продолжено в работах отечественных ученых А.С.Компанейцем и Д.А.Киржницем [5] и окончательно с середины 60-х годов получило в нашей стране несколько направлений разработок в зависимости от того как определялась система волновых функций основного состояния электронов.

Это работы групп Калиткина Н.Н. (квантово-статистическая модель вещества КСМ и ее модификации модели ТФП) [1-2], Синько Г.В. (модель самосогласованного поля) [7], Никифорова А.Ф., Новикова В.Г., Уварова В.Б. (модифицированная модель Хартри - Фока - Слетера МХФС) [8], Киржница Д.А., Шпатаковской Г.В. (квазиклассическая оболочечная модель КОМ) [9] и др.

В практическом плане в этих работах вклад электронной компоненты изучен (и продолжает! изучаться) до мельчайших подробностей. Результатом проделанной огромной работы является то, что наибольшую неопределенность в величину свободной энергии вносит в настоящее время скорее не электронная составляющая, а так называемая поправка на неидеальность, т.е. корректный учет потенциальной энергии взаимодействия ядер между собой (в записи (6) это второе слагаемое).

Соответствующий фактор проявляется при твердотельных плотностях, когда отношение вклада потенциальной энергии к кинетической в расчете на одну частицу начинает заметно приближаться к единице. При этом вклад микрополя (слагаемое $1/2T * \sum_{i \neq j} Z^2 / |R_i - R_j|$), логичнее учесть непосредственно как вклад в свободную энергию, а не только посредством обрезания статистических сумм ионов, как это теперь принято (см. [2

]), т.е. уменьшением числа слагаемых или их величин в статистических суммах из-за влияния микрополя.

Рассматриваемое слагаемое по своей сути является случайным числом из-за хаотичного расположения ионных остовов друг по отношению к другу (или иными словами из-за хаотичной природы векторов R_i). Заметим, что согласно (5а), (6) вклад в F от этого слагаемого составит

$$\Delta F/T = -\ln Z_{\text{мкп}} = -1/2T \sum_{i \neq j} Z^2 / |R_i - R_j| \quad (7)$$

Эта формула определяет поправку в энергию, энтропию и давление ядерной подсистемы согласованным образом и, соответственно:

$$\Delta E = \Delta F + \Delta(S \cdot T)$$

$$\Delta S = -\partial / \partial T (\Delta F) \quad (7a)$$

$$\Delta p = -\partial / \partial V (\Delta F)$$

3. Расчет случайных сумм в (7).

В этом разделе рассмотрим простой способ расчета выражений (7), посредством использования функции распределения напряженности плазменного микрополя ионов. Для этого заметим, что

$1/2 \sum_{i \neq j} 1/|R_i - R_j| = 1/2 (1/|R_1 - R_2| + 1/|R_2 - R_1|) = (1/2) \cdot 2/|R_1 - R_2| = 1/|R_1 - R_2|$ при $N=2$, и по аналогии могла бы быть записана следующим образом:

$1/|R_1 - R_2| = \sum_{i=1}^{N-1} (1/|R_i - R_2|) = \sum_{i=1}^{N-1} \left(\sum_{j=i+1}^N (1/|R_i - R_j|) \right)$. Что для общего случая с $N \geq 2$ позволяет написать

$$1/2 \sum_{i \neq j} 1/|R_i - R_j| = \sum_{i=1}^{N-1} \left(\sum_{j=i+1}^N (1/|R_i - R_j|) \right) \quad (8)$$

Правая часть (8) специальным образом упорядочивает порядок перебора индексов при суммировании. Это иллюстрирует Рис.1 ниже расчета парных сил взаимодействия согласно правой и левой частей в этой формуле для случая $N=4$:

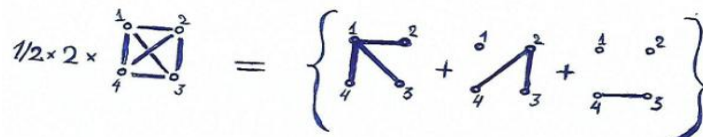


Рис.1

В левой части рисунка показана диаграмма подсчета числа независимых парных взаимодействий (сплошные линии между точками) равная числу сочетаний пар в системе из четырех частиц $C^N_2 = N!/2! \cdot (N-2)! = 6$ при $N=4$, что и подтверждает правая часть, не делая разницы, в каком порядке производится вычитание радиус-векторов в знаменателях

слагаемых, т.к. в расчетах учитываются только относительные расстояния (иными словами длины).

Распишем правую часть (8) следующим образом:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{N-1} \left(\sum_{j=i+1}^N \frac{1}{|R_i - R_j|} \right) &= \sum_{i=1}^{N-1} (N-i) \left(\frac{1}{N-i} \sum_{j=i+1}^N \frac{1}{|R_i - R_j|} \right) = \sum_{i=1}^{N-1} (N-i) w_i = \\ &= N(N-1)/2 * \left(\sum_{i=1}^{N-1} ((N-i)/(N(N-1)/2)) * w_i \right) = N(N-1)/2 * \left(\sum_{i=1}^{N-1} p_i w_i \right), \text{ где} \quad (9) \\ p_i &= (N-i)/(N(N-1)/2); w_i = \left(\frac{1}{N-i} \sum_{j=i+1}^N \frac{1}{|R_i - R_j|} \right) \end{aligned}$$

Заметим, что:

$$\sum_{i=1}^{N-1} p_i = 1/(N(N-1)/2) [N * (\sum_{i=1}^{N-1} 1) - (\sum_{i=1}^{N-1} i)] = 1/(N(N-1)/2) [N(N-1) - N(N-1)/2] = 1,$$

или числа p_i нормированы на единицу (т.е. их можно принять весовыми множителями), а в сумме функций w_i имеется $(N-(i+1))$ слагаемое, т.е. на одно слагаемое меньше, чем этого требуется для вычисления среднего арифметического обратных расстояний. Таким образом, если принять, что w_i это средние обратные расстояния для i -ой частицы, то ошибка этого утверждения будет составлять $\sim \langle 1/R \rangle / (N-i)$ при $i < N$ и является максимальной при $i = N-1$, здесь $\langle 1/R \rangle$ - арифметическое среднее обратного расстояния между частицами в подсистеме. Однако, если рассмотреть полное двойное суммирование в (9), то данные «ошибочные» слагаемые фигурируют в (9) с весовыми коэффициентами p_i близкими к $1/N(N-1)/2$, т.е. их веса на множитель $\sim 1/N$ меньше, чем для первых членов суммы (9). Таким образом, принятие w_i за среднеарифметические от обратных расстояний вносит ошибку порядка $1/N$ и при большом числе частиц перестает играть роль.

Итак, если рассматривать систему с очень большим, но фиксированным числом частиц N , то формула (9) с небольшой ошибкой порядка $1/N$ вычисляет средневзвешенную величину парных взаимодействий частиц в системе с весовыми коэффициентами p_i т.к. имеет место запись:

$$\sum_{i=1}^{N-1} \left(\sum_{j=i+1}^N \frac{1}{|R_i - R_j|} \right) = N(N-1)/2 * \left(\sum_{i=1}^{N-1} (p_i / (\sum_{i=1}^{N-1} p_i)) * w_i \right); 1 = (\sum_{i=1}^{N-1} p_i) \quad (10)$$

Перейдем в формуле (10) к пределу при $N \rightarrow \infty$, т.е. рассмотрим континуальный (предел непрерывной среды) предел правой части (10). Для (7) в качестве определения можем записать:

$$\Delta F/NT = -\ln Z_{\text{МКП}}/N = -1/2NT * \sum_{i \neq j} Z^2 / |R_i - R_j| = -Z^2/T * (N-1) \iint dR dR_1 g(R, R_1) / |R - R_1|, \text{ где}$$

$$\iint dR dR_1 g(R, R_1) / |R - R_1| = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\sum_{i=1}^{N-1} (p_i / (\sum_{i=1}^{N-1} p_i)) * w_i \right) \quad (7b)$$

Причем $\iint dR dR_1 g(R, R_1) = 1$, а функция $dR dR_1 g(R, R_1)$ - определяет вероятность того, что если одна частица находится в точке R , то другая в точке R_1 . В более простой записи (7b) означает, что $\Delta F/NT \sim Z^2 N/T * \langle 1/R \rangle$. Иными словами в правой части (7b) стоит среднее обратное расстояние между парой частиц в системе усредненное по всем парам, которых $\sim N$. При этом видно, что при $N \rightarrow \infty$ $\Delta F/NT \sim N$ или отношение средней потенциальной

энергии кулоновского взаимодействия приходящейся на одну частицу к средней кинетической энергии $\sim 3T/2$ составляет $\sim N$ и стремится к ∞ при $N \rightarrow \infty$, т.е. плазма всегда неидеальна, что неверно.

Этого результата и следовало ожидать, т.к. при подходе, рассмотренном выше, были учтены все пары взаимодействующих частиц в объеме V , которых при $N \rightarrow \infty$ и, соответственно при $V \rightarrow \infty$, оказывается бесконечно много. Физически это означает, что учитываются все дальнотдействующие корреляции между кулоновскими частицами, хотя, ясно, что непрерывный электронный фон экранирует взаимодействие далеких ионных островов между собой.

Если исправляя ситуацию, учитывать в ядерном слагаемом экранировку электронами непосредственно, то влияние электронов будет учитываться дважды из-за того, что в свободной энергии (6) уже имеется слагаемое $-T \ln(Z^3)$, которое учитывает такое влияние в рамках ячеечных моделей.

Другой путь состоит в том, чтобы исправить ситуацию только через ядерную компоненту, вводя понятие среднего микрополя, действующего на тестовый ион в данной точке, через суммирование индивидуальных микрополей ионов w_i , предположив например, что вклад в w_i для любого i дает только ближайший сосед (наличием вкладов от других частиц пренебрегаем, что справедливо как раз из-за экранировки электронами полей далеких ядерных островов). Или это же предположение можно трактовать еще как то, что учитывается вклад от ближайших соседей, которых ограниченное число (ограниченно например первой координационной сферой) через кратные, парные воздействия соседних частиц. Тогда в (9):

$$w_i = (1/(N-i)) * (1/|R_i - R_{i \min}|), \quad i=1, \dots, N-1; \quad R_{i \min} \text{ радиус-вектор положения ближайшего соседа к } i\text{-му иону с координатой } R_i \quad (11).$$

Подставив (11) в (10), получаем вместо (7b) следующее выражение

$$\Delta F/T = -\ln Z_{\text{МКП}} = -1/2T * \sum_{i \neq j} Z^2 / |R_i - R_j| = -Z^2/T \sum_{i=1}^{N-1} (N-i) (1/(N-i) * 1/|R_i - R_{i \min}|) = -(Z^2/T)(N-1)(1/(N-1) * \sum_{i=1}^{N-1} 1/|R_i - R_{i \min}|). \text{ Вклад на одну частицу в этом случае составит}$$

$$\Delta F/NT = -\ln Z_{\text{МКП}}/N = -1/2NT * \sum_{i \neq j} Z^2 / |R_i - R_j| = -(Z^2/T)(1-1/N)(1/(N-1) * \sum_{i=1}^{N-1} 1/|R_i - R_{i \min}|).$$

Переходя к пределу $N \rightarrow \infty$ в этом выражении, получаем окончательно

$$\Delta F/NT = -(Z^2/T) \int dR_1 w(R_1) / |R_1 - R|, \text{ где } \int dR_1 w(R_1) / |R_1 - R| = \lim_{N \rightarrow \infty} (1-1/N)(1/(N-1) * \sum_{i=1}^{N-1} 1/|R_i - R_{i \min}|) \Big|_{N \rightarrow \infty}; \text{ причем: } \int dR_1 w(R_1) = 1 \quad (7c).$$

Отметим, что $dR_1 w(R_1)$ определяет вероятность того, что для иона, находящегося в точке R , имеется ближайший сосед в точке R_1 . В этом случае при вычислениях средней энергии взаимодействия ионов в системе перебираются все частицы с их ближайшими соседями, число которых $\sim N$.

Заметим, что два вектора R_1 и R всегда однозначно определяют одну плоскость и потому модуль их разности расписывается $|R_1 - R| = (R_1^2 + R^2 + 2RR_1 \cos \theta)^{1/2}$, где θ полярный угол между векторами в этой плоскости. Если направление одной из осей координат сделать со направленным с R и просуммировать все азимутальные углы от 0 до 2π , то (7с) переписывается в виде:

$$\begin{aligned} \Delta F/NT &= -(Z^2/T) \iiint R_1^2 dR_1 d\theta \sin \theta d\varphi w(R_1) / (R^2 + R_1^2 + 2RR_1 \cos \theta)^{1/2} = \\ &= -(Z^2/T) (2\pi) \int R_1^2 dR_1 w(R_1) \left(\int_0^\pi \frac{dx}{(R^2 + R_1^2 + 2RR_1 x)^{1/2}} \right) = \\ &= -(Z^2/T) (8\pi) \int R_1^2 dR_1 w(R_1) \left[\frac{1}{((R^2 + R_1^2 - 2RR_1)^{1/2} + (R^2 + R_1^2 + 2RR_1)^{1/2})} \right] \quad (7d). \end{aligned}$$

Будем считать, что для любого тестового иона в системе при $N \rightarrow \infty$, а следовательно и при $V \rightarrow \infty$ (так, что $\rho = N/V = \text{Const}$), ближайшие соседи распределены изотропно, т.е. w зависит только от модуля R_1 . Полагая в (7d) $R=0$, т.е. помещая тестовый ион в начало системы координат окончательно получаем:

$$\begin{aligned} \Delta F/NT &= -(Z^2/T) (4\pi) \int R_1^2 dR_1 w(R_1) (1/R_1), \text{ при дополнительном условии нормировки} \\ (4\pi) \int R_1^2 dR_1 w(R_1) &= 1 \quad (7e). \end{aligned}$$

Нормировка возникает из-за того, что для любого иона в плазме всегда найдется ближайший сосед.

4. Сравнение поправок на неидеальность, вычисленных для разных функций распределения согласно (7e).

Из физики плазмы давно известны функции распределения микрополя в плазменной среде, которые используются сейчас даже в инженерных расчетах. Это распределение ближайшего соседа [10], распределение Хольцмарка [3, 11] и гауссово распределение [3]. Все эти три широко известные функции выражены через модуль напряженности электрического поля. Поскольку закон Кулона позволяет сопоставить любой напряженности поля заданный радиус-вектор между частицами соотношением $E/E_0 = (R_0/R)^2$, E_0 , R_0 - параметры, то это означает, что данные распределения могут быть выражены через расстояния между частицами и определять вероятности частицам иметь заданные расстояния. Иными словами они именно то, что нужно в (7e) для расчета поправки в свободную энергию одной частицы через среднее микрополе, сформированное окружающими ионными остовами. Если это сделать, то (7e) позволяет протестировать данные распределения на пригодность определять вклад ядерных взаимодействий в расчеты термодинамических величин в плотно сжатой, сильно неидеальной плазме, при известном вкладе в свободную энергию.

Из расчетов молекулярной динамикой для однокомпонентной плазмы известно, что вклад ядерных взаимодействий в свободную энергию в пределе больших степеней неидеальности (когда $\Gamma \rightarrow \infty$) составляет на одну частицу (помимо кинетической части равной $3T/2$) $\approx -0,9\Gamma$. Более точно эта зависимость аппроксимирована в [1 стр.139] формулой:

$$f(\Gamma) = -9\Gamma / (10 + 9\sqrt{3}/\sqrt{\Gamma}), \Gamma = Z^2/RT \text{ параметр неидеальности, (12)}$$

которая при $\Gamma \rightarrow \infty$ обладает данной асимптотикой. (12) позволяет с помощью (7е) изучить возможности указанных выше распределений описать данный предел.

4.1 Распределение ближайшего соседа (БС).

В этом случае

$$w(R) \cdot 4\pi \cdot R^2 = dW_{\text{БС}}/dR \text{ и } dW_{\text{БС}}/dR = 4\pi \cdot F_{\text{БС}} \cdot R^2 \cdot \exp(-(R/R_0)^3) \quad [10], \quad (13)$$

где $F_{\text{БС}}$, R_0 - параметры.

Распределение максимально при $R_{\text{max}}/R_0 = (2/3)^{1/3} \approx 0,874$ и в максимуме составляет $(dW_{\text{БС}}/dR)_{\text{max}} = 3 \cdot (2/3)^{2/3} \cdot e^{-2/3} \approx 1,175$. Подставив (13) в (7е), из условия нормировки получаем, что: $F_{\text{БС}} = 3(1+\varphi)/4\pi R_0^3$, здесь φ - поправочный множитель, введенный в нормировку, чтобы совместить предел (7е) с 0,9Г. Откуда:

$$\Delta F/NT = -F_{\text{БС}} (Z^2/T) (4\pi) \int R dR \exp(-(R/R_0)^3) = -F_{\text{БС}} R_0^2 (Z^2/T) (4\pi) \int_0^\infty dx \exp(-x) x^{2/3-1} = - (1+\varphi) \cdot (Z^2/TR_0) G(2/3) \approx -1,354(1+\varphi) \cdot \Gamma, \quad G(2/3) \text{ - гамма функция от } 2/3 \quad (14).$$

Сравнение (14) и (12) при $\Gamma \rightarrow \infty$ дает $\varphi = -0,335$.

4.2 Распределение Гаусса (Gauss).

В этом случае

$$dW_{\text{GAUSS}}/dR = 4/\sqrt{\pi} \cdot F_{\text{GAUSS}} \cdot R^2 \cdot \exp(-(R/R_0)^2) \quad [3], \text{ где } F_{\text{GAUSS}}, R_0 \text{ - параметры} \quad (15).$$

Оно максимально при $R_{\text{max}}/R_0 = 1$ и в максимуме составляет $(dW_{\text{GAUSS}}/dR)_{\text{max}} = (4/\sqrt{\pi} \cdot e^{-1}) \approx 0,830$. Из условия нормировки: $F_{\text{GAUSS}} = (1+\varphi)/R_0^3 \cdot (\sqrt{\pi}^3)$, что дает для поправки на неидеальность плазмы соотношения:

$$\Delta F/NT = -F_{\text{GAUSS}} (Z^2/T) (4\pi) \int R dR \exp(-(R/R_0)^2) = -F_{\text{GAUSS}} R_0^2 (Z^2/T) (2\pi) \int_0^\infty dx \exp(-x) = - (1+\varphi) \cdot (Z^2/TR_0) \cdot (2\pi/\sqrt{\pi}^3) \approx -1,128(1+\varphi) \cdot \Gamma. \text{ Отсюда}$$

$$\Delta F/NT = -(1+\varphi) \cdot (Z^2/TR_0) (2\pi/\pi^{3/2}) \approx -1,128(1+\varphi) \cdot \Gamma, \quad \varphi \approx -0,228 \quad (16).$$

4.3 Распределение Хольцмарка. В этом случае распределение по R неизвестно и может быть получено из распределения Хольцмарка напряженности электрического поля в плазме заменой $(R/R_0)^2 = E_0/E = 1/\beta = \gamma^2$, что дает (см. [3,11]):

$$dW_H/d\beta = F_0 \cdot \beta_0 \int_0^\infty dz z \sin(\beta z) \cdot \exp(-z^{1.5}) \text{ и} \quad (17)-(17a)$$

$$dN/d\gamma = 4\pi \gamma^2 (dW_H/d\beta) \cdot |d\beta/d\gamma| = 8\pi F_0 \cdot \gamma_0 \int_0^\infty dz z \sin z \cdot \exp(-(\gamma \sqrt{z})^3), \text{ где } F_0, R_0 \text{ - параметры, } \gamma = R/R_0.$$

Из-за наличия нескольких эквивалентных форм записи распределения Хольцмарка в Приложении 2 приведена некоторая сводка этих распределений с выводом. В Приложении 2 приведен также вывод формулы аппроксимирующей

распределение (17) степенным рядом, справедливый при больших значениях аргумента $y=1/\beta$:

$$dN/dy = (16\pi F_0 G(2)/3)(1/y^5)(1-b/y^4) = 16,75516 F_0 \beta^{5/2} (1-b\beta^2) \quad (17b)$$

$$b = G(10/3)/(3!G(2)) \approx 0,46303; \quad G(2)=1.$$

Распределение (17) максимально при $R_{\max}/R_0 = \sqrt{(3A(\beta, 5/2)/2A(\beta, 1))^3} \approx 1,61$ (здесь $A(\beta, \omega) = \int_0^\infty dz z^\omega \sin(z) \exp(-(z/\beta)^{1,5})$ и в максимуме составляет $(dW_H/dR)_{\max} \approx 0,37$. Из условия нормировки для (17a): $F_H = ((3/8\pi)/G(2/3)) * (1+\varphi)/R_0^3$, что дает для поправки на неидеальность плазмы соотношение:

$$\Delta F/NT = -(1+\varphi) * (Z^2/TR_0)(G(1/3)/G(2/3)) * (\pi/8)^{1/2} \approx -1,240(1+\varphi) * \Gamma, \quad \varphi \approx -0,274 \quad (18)$$

Этот результат является промежуточным между распределением Гаусса и распределением ближайшего соседа (см. далее Таблицу 1). Надо отметить, что данное значение всего на доли процента (0,08%) отличается от среднего арифметического между Гауссом и ближайшим соседом, т.е. обеспечивает практически среднее значение между данными случаями.

Это кажется удивительным, но распределение Хольцмарка в пределе малых расстояний (когда $\Gamma \rightarrow \infty$) сближения дает более худшее описание вклада ядер в термодинамику, чем стандартное гауссово распределение. Это согласуется с ранее опубликованными идеями, высказанными в [3].

Вышеприведенный результат (18) доказан в Приложении 3. Здесь приведем лишь сводку полученных результатов, сведя их в одну таблицу.

Таблица1

	$(-1)\Delta F/NT/\Gamma$ при $\Gamma \rightarrow \infty$ из (7e)	φ
dW_{BC}/dR	1,354	-0,335
dW_H/dR	1,240	-0,274
dW_{GAUSS}/dR	1,128	-0,202

Как следует из представленных данных наилучшее согласие с пределом (12) при $\Gamma \rightarrow \infty$ равным -0,9 обеспечивает именно гауссова форма функции распределения напряженности ионного микрополя, выраженная через расстояние между частицами, а наихудшее -распределение Ближайшего соседа. Математический анализ, из-за чего это происходит, проведем в следующем разделе.

5.Анализ результатов.

Для проведения анализа заменим функции распределения (13), (15), (17a) их моделями-аналогами, выделив при этом только 2 вклада: составляющую описывающую поведение соответствующего распределения вероятности при малых аргументах и

составляющую описывающую поведение распределения при больших аргументах. При таком упрощении, как можно заметить, все три распределения описываются одним семейством зависимостей:

$$dW/dx = \Phi * x^{\alpha} * (1 - bx^{\beta}), 0 \leq x \leq x_{\max}, x_{\max} = (1/b)^{1/\beta}, d^2W/dx^2|_{x=x_0} = 0$$

$$\text{для } x_0 = (\alpha/\beta / (b(1 + \alpha/\beta)))^{1/\beta}, \quad (19)$$

Φ , α и β - параметры, следующие из вида распределений. При этом первый степенной сомножитель в (19) моделирует влияние на распределение малых аргументов, а второй больших, или «хвостов» распределений (здесь следует отметить, что для распределения Хольцмарка «хвостом» распределения будет являться поведение частиц при малых взаимных расстояниях, т.к. согласно введенному определению $1/\beta = (R/R_0)^2$).

Из (7е) следует, что подынтегральные выражения для вычисления средних обратных расстояний $\langle 1/x \rangle$ у данных распределений имеют тот же вид (19), причем в двух из них достаточно заменить α на $\alpha-1$, а в распределении, соответствующему случаю Хольцмарка α заменить на $\alpha+1/2$. Рассмотрим, как данные распределения формируют средние обратные расстояния. Для этого в формулах (13) и (15) разложим экспоненты в ряд Тейлора, сохранив только два первых слагаемых, а в (17b) отбросим члены разложения по степеням β старше, чем $o(\beta^2)$. Получим следующую таблицу (Таблица2) и набор графиков функций-аналогов см. Рис.2. Таблица2

	БС (ближ-й сосед)	GAUSS	HOLTSMARK
$\alpha =$	1,000	1,000	3,000
$\beta =$	3,000	2,000	2,000
$b =$	1,000	1,000	0,463
$x_{\max} =$	1,000	1,000	1,470
$\Phi =$	0,420	0,416	0,930
$\alpha/\beta =$	0,333	0,500	1,500
$x_0 =$	0,630	0,577	1,138
$(dW/dx)_{x=x_0} =$	0,198	0,160	0,173
$\Phi_{\text{real}} =$	1,205	1,000	1,107

В таблице2 последняя строка- это площади под кривыми семейства (19), которые являются подынтегральными выражениями в (7е) при расчете средних обратных расстояний, если их выразить в единицах площади семейства Gauss (т.е. для случая $\alpha=1$; $\beta=2$). Предпоследняя строка - значения распределений (19) в максимуме. Первые четыре строки таблицы это параметры распределений (более точно- это распределения умноженные на обратные расстояния) согласно (19). Сравнивая изучаемые кривые с учетом соотношения между площадями под ними 1:1,1:1,2, становится возможным сопоставить, каким образом набирается каждый из интегралов (7е) при расчете средних обратных расстояний.

В частности видно (см.Рис.2), что у распределения Ближайшего соседа (БС) влияние второго сомножителя- дальнего «хвоста» распределения начинается чуть позже, чем у распределения Gauss именно при тесных сближениях частиц (первые сомножители, согласно первой строке Таблицы2, описывающие рост распределений при малых аргументах, у них одинаковы), что проявляется в том, что эта функция имеет немного больший максимум (значение максимума приведено в предпоследней строке соответствующего столбца) при $x=x_0$ и, как следствие, распределение занимает примерно на 20% большую площадь под кривой.

Функция-аналог для распределения Хольцмарка перевернута к другим распределениям тем обстоятельством, что она на рисунке 2 приведена как функция величины $\beta=1/y^2=(R_0/R)^2$ или квадрата обратных расстояний между частицами. При этом видно, что именно «хвост» распределения (т.е. малые значения, когда $\beta \ll 1$) приводит к тому, что при использовании данного распределения обеспечивается значительно большее среднее расстояние соответствующее максимуму распределения ($x_0=1,14$ по отношению примерно к 0,6 у других распределений). Именно из-за этого влияние второго сомножителя (т.е. малых расстояний сближения) на конечный результат начинается слишком поздно по сравнению с другими распределениями, что и проявляется в чуть большей площади (примерно на 11%) под кривой по сравнению со случаем зависимости типа Gauss (см. Рис.2).

Также следует отметить, что в распределении Хольцмарка в интервале $0 < x < 0,35$ имеется небольшой «излишек» площади под кривой, которого нет в распределениях (13),(15) и вклад которого, также должен приводить к увеличению значения среднего обратного расстояния при расчете через (7e). Этот «излишек» относится к большим расстояниям между частицами, и потому он верен (принято, что на больших расстояниях распределение Хольцмарка справедливо) и, следовательно, чтобы его компенсировать, на малых расстояниях реальный спад распределения должен быть еще круче (чем спад Хольцмарка, который порядка $-bx^{3/2}$).

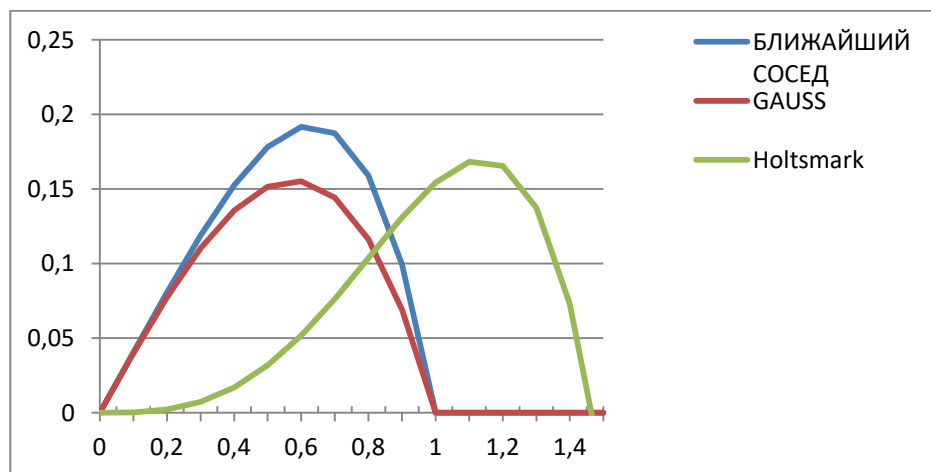


Рис.2. Функции- аналоги распределений (13), (15), (17а), согласно (7е) умноженные на обратное расстояние между частицами. Площади под кривыми нормированы на площадь под кривой GAUSS, которая принята за единицу, причем относятся к площади GAUSS в пропорциях 1:1,1:1,2 чтобы обеспечить соответствие вычисляемых обратных расстояний согласно значений второго столбца в Таблице 1.

6.Заключение.

Основным результатом данной заметки можно считать наблюдение того факта, что основную часть ядерной поправки в термодинамику в сильно сжатой, неидеальной плазме можно учесть как вклад от флуктуирующих микрополей ионов. Причем именно распределения типа гаусса (т.е. распределения, имеющие максвелловский «хвост» при больших расстояниях) более правильно передают вклад микрополя ядер в описание термодинамики сильно сжатой, неидеальной плазмы при параметре неидеальности $\Gamma \gg 1$.

Данный факт косвенно согласуется с результатами работ [3], где количество наблюдаемых спектральных линий в плотно сжатой разогретой плазме сравнивалось с расчетами данного количества в зависимости от вида распределения микрополя и сделан вывод о том, что именно гауссово распределение наилучшим образом воспроизводит наблюдаемые данные.

Приложение 1.

Для проведенных вычислений полезно схематично показать, как получается стандартное распределение Хольцмарка.

$$\begin{aligned} dW_H/dE &= \Phi_0 \cdot \int dE_1 \dots dE_N \delta(E - \sum_{i=1}^N E_i) \cdot \prod_{i=1}^N p(E_i) = \langle \delta(E - \sum_{i=1}^N E_i) \rangle = \langle \int d^3k \exp(i(kE - \sum_{i=1}^N (E_i k))) \rangle = \\ &= \int_0^\infty d\varphi \int_0^\infty dk k^2 \int_0^\pi \sin\theta d\theta \exp(iEk \cos\theta) \langle \exp(-i \sum_{i=1}^N (E_i k)) \rangle = 2\pi \int_0^\infty dk k^2 [\exp(iEk) - \exp(-iEk)] / (2iEk) \langle \exp(-i \sum_{i=1}^N (E_i k)) \rangle = \\ &= 2\pi \int_0^\infty dk k (\sin(Ek)/E) \cdot I(k) \end{aligned} \quad (П1)$$

Таким образом, основная трудность состоит в вычислении функции $I(k)$. Если принять электрическое микрополе изотропным или, что $I(k) = I(|k|)$, получим

$$\begin{aligned} I(k) &= \langle \exp(-i \sum_{j=1}^N (E_j k)) \rangle = \langle \exp(-ik \sum_{j=1}^N (r_j/r_j^3)) \rangle = \langle \exp(-ik \sum_{j=1}^N (\sin\theta_j \cos\varphi_j)/r_j^2) \rangle = \\ &= \int \prod_{j=1}^N \langle \exp(-ik(\sin\theta_j \cos\varphi_j)/r_j^2) \rangle \end{aligned} \quad (П2)$$

$$\text{Учтем, что } \langle f \rangle = \int \dots \int dr_1 \dots dr_N f(r_1 \dots r_N) / \int \dots \int dr_1 \dots dr_N = (1/V^N) \int \dots \int dr_1 \dots dr_N f(r_1 \dots r_N) \quad (П3)$$

Предположим, что $f(r_1 \dots r_N) = \prod_{j=1}^N f_j(r_j)$. Подставим это выражение в (П3). Получим:

$$\langle f \rangle = (\int dr_1 f(r_1) / \int dr_1)^N = (\int dr_1 f(r_1) - \int dr_1 + \int dr_1 / \int dr_1)^N = (1 + \int dr_1 (f(r_1) - 1) / \int dr_1)^N = (1 + (N/V) \int dr_1 (f(r_1) - 1) / N)^N \Big|_{N \rightarrow \infty} = (1 + \rho_0 \int dr_1 (f(r_1) - 1) / N)^N \Big|_{N \rightarrow \infty} = \exp(\rho_0 \int dr_1 (f(r_1) - 1)) \quad (\text{П4})$$

Тогда если $f(r_j) = \exp(-ik(\sin\theta_j \cos\varphi_j) / r_j^2)$, то согласно (П4)

$$I(k) = \exp(\rho_0 \int dr_1 (\exp(-ik(\sin\theta_1 \cos\varphi_1) / r_1^2) - 1)) = \exp(V(k)). \quad (\text{П5})$$

Для $V(k)$ получаем: $V(k) = \rho_0 \int d^3 r_1 (\exp(-ik(\sin\theta_1 \cos\varphi_1) / r_1^2) - 1) = \rho_0 \int dr r^2 \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\varphi (\exp(-ik(\sin\theta \cos\varphi) / r^2) - 1) =$

$$2\pi\rho_0 \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\theta \sin\theta (-1/2 \int_0^\infty dt (J_0(k \sin\theta t) - 1) / t^{5/2}) = -\pi\rho_0 \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\theta \sin\theta (k \sin\theta)^{3/2} \int_0^\infty dv (J_0(v) - 1) / v^{5/2} = -\lambda k^{3/2}, \text{ где } \lambda\text{-параметр.} \quad (\text{П6})$$

Подставим (П6) в (П5), а (П5) в (П1), учтем, что в (П5), (П6) опущен нормировочный множитель Φ_0 , получим:

$$dW_H/dE \sim E^2 \int_0^\infty dk k (\sin(Ek)/E) \exp(-\lambda k^{3/2}) = (E/\lambda^{4/3}) \int_0^\infty dx x (\sin(xE/\lambda^{2/3}) \exp(-x^{3/2})) = F_{01} \beta \int_0^\infty dz z \sin(\beta z) \exp(-z^{1,5}) \text{ или}$$

$$dW_H/d\beta = F_0 \beta \int_0^\infty dz z \sin(\beta z) \exp(-z^{1,5}), \text{ где } \beta = E/\lambda^{2/3} = E/E_0; \quad (\text{П7})$$

Что согласуется с (17). Константу нормировки F_0 и другие эквивалентные формулы для расчета данного распределения приведем в следующем разделе.

Приложение 2.

Рассмотрим функцию распределения Хольцмарка в следующем виде:

$$dW_H/d\beta = F_0 \beta \int_0^\infty dz z \sin(\beta z) \exp(-z^{1,5}) \quad (\text{П8})$$

Вычислим нормировку:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty d\beta (dW_H/d\beta) &= F_0 \int_0^\infty d\beta \beta \int_0^\infty dz z \sin(\beta z) \exp(-z^{1,5}) = F_0 \int_0^\infty dz z \exp(-z^{1,5}) \int_0^\infty d\beta \beta \sin(\beta z) = \\ &= F_0 \int_0^\infty dz z \exp(-z^{1,5}) (-d/dz \int_0^\infty d\beta \cos(\beta z)) = F_0 \int_0^\infty dz z \exp(-z^{1,5}) (-d/dz (\pi/2 \delta(z))) = \\ &= (\pi/2) F_0 \int_0^\infty dz z \exp(-z^{1,5}) (-d/dz (\delta(z))) = (\pi/2) F_0 [-z \exp(-z^{3/2}) \delta(z) \Big|_0^\infty + \int_0^\infty dz \delta(z) (\exp(-z^{3/2}) + (3/2) z^{3/2} \exp(-z^{3/2}))] = (\pi/2) F_0 \int_0^\infty dz \delta(z) \exp(-z^{3/2}) = (\pi/2) F_0 = 1 \end{aligned}$$

$$\text{Откуда } F_0 = 2/\pi. \quad (\text{П9})$$

При вычислениях было принято $\int_0^\infty d\beta \cos(\beta z) = 1/2 \int_{-\infty}^\infty d\beta \cos(\beta z) = 0,5(\pi \delta(z))$; $z \delta(z) \Big|_{z=0} = 0$ и учтено, что $\int_0^\infty dz z^{3/2} \exp(-z^{3/2}) \delta(z) = 0$.

Заметим, что (П8) переписывается в виде

$$dW_H/d\beta = F_0 \beta \int_0^\infty dz z \sin(\beta z) \exp(-z^{1,5}) = (F_0/\beta) \int_0^\infty dx x \sin x \exp(-(x/\beta)^{1,5}) \quad (\text{П10}).$$

Если ввести новую переменную $y = R/R_0$, тогда из закона Кулона $\beta = E/E_0 = (R_0/R)^2 = 1/y^2$ и

$dW_H/d\beta = dW_H/dy \cdot |dy/d\beta|$, что дает $dW_H/dy = dW_H/d\beta \cdot |d\beta/dy|$

откуда следует

$$dW_H/dy = |d\beta/dy| \cdot (F_0 y^2) \cdot \int_0^\infty dz z \sin z \cdot \exp(-y\sqrt{z})^3 = (2F_0/y) \cdot \int_0^\infty dz z \sin z \cdot \exp(-y\sqrt{z})^3.$$

Отсюда можно получить сферически-симметричное распределение Хольцмарка, выраженное через радиус-векторы между частицами (см.17а):

$$dN/dy = 4\pi y^2 \cdot dW_H/dy = 4\pi y^2 \cdot (2H_0/y) \cdot \int_0^\infty dz z \sin z \cdot \exp(-y\sqrt{z})^3 \text{ или}$$

$$dN/dy = (8\pi H_0) y \cdot \int_0^\infty dz z \sin z \cdot \exp(-y\sqrt{z})^3, \quad H_0 - \text{своя нормировка} \quad (\text{П10}).$$

Рассмотрим разложение (П10) в асимптотический ряд при больших аргументах y . В этом случае основную роль в интеграле играют малые z , что дает возможность заменить синус его приближенными выражениями. Учтем в таком выражении только два первых члена, чтобы получившееся разложение соответствовало формуле (19). Получим:

$$dN/dy = (8\pi H_0) y \cdot \int_0^\infty dz (z - z^3/3!) \cdot \exp(-y\sqrt{z})^3 = (8\pi F_0) y \cdot \int_0^\infty dz (z^2 - z^4/3!) \cdot \exp(-y\sqrt{z})^3 \text{ откуда}$$

$$dN/dy = (8\pi H_0) y \cdot (2/3) \left[\int_0^\infty du u \exp(-y^3 u) - 1/3! \int_0^\infty du u^{7/3} \exp(-y^3 u) \right] = (16\pi F_0/3) y \cdot [G(2)/y^6 - G(10/3)/(3!y^{10})]. \text{ Или окончательно}$$

$$dN/dy = (16\pi H_0 G(2)/3) (1/y^5) (1 - b/y^4) = 16,75516 F_0 \beta^{5/2} (1 - b\beta^2), \quad (\text{П11})$$

$b = 28\pi / (G(2) 81 \sqrt{3} G(2/3)) \approx 0,46303$. Для вычисления (7е) требуется функция $(dN/dy)/y$ которая согласно (П11) равна

$$(dN/dy) \cdot \sqrt{\beta} = 16,75516 H_0 \beta^3 (1 - b\beta^2), \quad (\text{П12})$$

имеет максимум при $\beta_0 = (3/5b)^{0,5} \approx 1,13833$ и положительна для $\beta < 1,46958$. При вычислении (П11), (П12) использовано: $G(2)=1$; $G(10/3) = (7 \cdot 3 \cdot 1 / (1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot 3^3)) \cdot G(1/3)$; $G(1/3) = \pi / (\sin(\pi/3) G(2/3)) = 2\pi / (\sqrt{3} G(2/3))$; $G(2/3) \approx 1,35412$; $G(x)$ -гамма функция.

Приложение 3.

Вычислим среднее обратное расстояние для функции распределения вероятности (П10). Для этого сначала определим нормировку H_0 .

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dy (dN/dy) &= \int_0^\infty dy (8\pi H_0) y \cdot \int_0^\infty dz z \sin z \cdot \exp(-y\sqrt{z})^3 = (8\pi H_0) \cdot \int_0^\infty dz z \sin z \cdot \int_0^\infty dy y \exp(-y\sqrt{z})^3 \\ &= (8\pi H_0) \cdot \int_0^\infty dz z \sin z \cdot \int_0^\infty du u \exp(-u)^3 = (8\pi H_0) \cdot \int_0^\infty dz z \sin z \cdot \int_0^\infty du u^2 \exp(-u)^3 / u = (8\pi/3 H_0) \cdot \int_0^\infty dz z \sin z \\ &\cdot \int_0^\infty dv \exp(-v) / v^{1/3} = (8\pi/3 H_0) \cdot M(1; \sin z) \cdot G(2/3) = 1 \end{aligned}$$

$$\text{Откуда: } H_0 = (3/8\pi) / (M(1; \sin z) \cdot G(2/3)), \quad (\text{П13})$$

$M(1; \sin z)$ -преобразование Меллина порядка 1 от функции $\sin z$ (не обращаем внимания, что формально данное преобразование может расходиться, т.к. в конечном ответе в этом случае будет фигурировать отношение расходящихся выражений, которое конечно).

Тогда для (7е) получаем:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dy (dH/dy)/y &= \int_0^\infty dy (8\pi H_0) \int_0^\infty dz z \sin z \exp(-y\sqrt{z})^3 = (8\pi H_0) \int_0^\infty dz z \sin z \int_0^\infty dy \exp(-y\sqrt{z})^3 \\ &= (8\pi H_0) \int_0^\infty dz \sqrt{z} \sin z \int_0^\infty du \exp(-u^3) = (8\pi H_0) \int_0^\infty dz \sqrt{z} \sin z \int_0^\infty du u^2 \exp(-u^3)/u^2 = (8\pi/3 H_0) \int_0^\infty dz \\ &\sqrt{z} \sin z \int_0^\infty dv \exp(-v)/v^{2/3} = (8\pi/3 H_0) * M(3/2; \sin z) * G(1/3). \end{aligned} \quad (П14)$$

Т.к. формально для преобразования Меллина:

$$M(3/2; \sin z) = G(3/2) * \sin(3/2 * \pi/2) \text{ и } M(1; \sin z) = G(1) * \sin(1 * \pi/2) = 1 \quad (П15), \text{ то}$$

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dy (dH/dy)/y &= (8\pi/3) * M(3/2; \sin z) * G(2/3) * (3/8\pi) / (M(1; \sin z) * G(2/3)) \\ &= (1/2\sqrt{2}) * G(1/2) * G(1/3) / G(2/3) = \sqrt{(\pi/8)(2\pi/\sqrt{3})} / G^2(2/3) \approx 1,23975 \approx 1,240 \end{aligned}$$

Откуда, восстанавливая размерность, получаем, что

$$\langle 1/R \rangle = 1,240/R_0 \quad (П16).$$

Приложение 4.

В статистической физике вводят самосогласованное поле [6 стр. 38] ионов для расчета статистической суммы, аналогично тому, как это делается в моделях КСМ и ТФП для электронной компоненты [1, 2]. Для электронов эта функция определяется численно [см. ссылки в 2]. В литературе практически не уделяется внимания расчету данной функции для ионной компоненты, кроме традиционного примера расчета экранирования кулоновского потенциала тестового иона легко подвижными электронами в плазме, что называют дебаевским экранированием. Покажем, что знание функции распределения микрополя в плазме позволяет вычислить данный потенциал.

Известно, что статистическая сумма ионов вычисляется через конфигурационный интеграл ионов следующим образом [13]:

$$\begin{aligned} Z_{\text{я}} &= (1/N!) \int \dots \int dr_1 \dots dr_N dp_1 \dots dp_N / (2\pi)^3 * \exp((- \sum p_i^2 / 2MT) - V(r_1 \dots r_N) / T) = \\ &= (1/N!) \prod_{i=1}^N (V \int p_i^2 dp_i / (2\pi)^3 * \exp(-p_i^2 / 2MT)) (\int \dots \int dr_1 \dots dr_N \exp(-0,5 \sum_{i,j}^{i \neq j} V_{ij} / T)) = K_{\text{я}} * (\int d^3r (1 - \exp(-V(r)/T)))^N \end{aligned} \quad (П17)$$

здесь, $K_{\text{я}}$ - вклад кинетической энергии движения ядер.

Откуда вклад в свободную энергию системы энергии взаимодействия ионов между собой, выраженный через самосогласованное сферически-симметричное поле есть:

$$\Delta F / NT = -\ln(1 + 4\pi \int r^2 dr (\exp(-V(r)/T) - 1) / V) \quad (П18)$$

Этот же вклад определяется формулой (7е). Откуда получаем интегральное уравнение для функции $V(r)$, если известна $w(R)$ и наоборот:

$$(\int r^2 dr (\exp(-V(r)/T) - 1) / V) = \exp((Z^2/T) \int R_1^2 dR_1 w(R_1) (1/R_1)) - 1 \quad (П19).$$

Заметим, что (П19) позволяет найти выражение второго вириального коэффициента [13] через функцию плазменного микрополя:

$$B(T) = -2\pi (\int r^2 dr (\exp(-V(r)/T) - 1)) = -2\pi V [\exp((Z^2/T) \int R_1^2 dR_1 w(R_1) (1/R_1)) - 1] \quad (П20)$$

Приложение 5. Если вводить функцию распределения микрополя как двухпараметрическую функцию $w(R_o, w_o, r)$ (R_o, w_o - не известные параметры, причем согласно закону Кулона $(r/R_o)^2 = E_o/E$), то условие нормировки и термодинамический предел $\Delta F/NT/\Gamma \rightarrow -0,9$ при $\Gamma \rightarrow \infty$ позволяют определять $w(R_o, w_o, r)$ однозначно через систему из 2-х алгебраических уравнений следующего вида:

$$\begin{aligned} 4\pi \int r^2 dr w(R_o, w_o, r) &= 1 \\ 4\pi R_o \int r dr w(R_o, w_o, r) &= 0,9 \end{aligned} \quad (П20)$$

7. Список литературы.

1. Калиткин Н.Н. Модели вещества в экстремальном состоянии, В сб. Математическое моделирование/Физико-химические свойства вещества, 1989, Наука, стр.114-161
2. Калиткин Н.Н. Квазизонное уравнение состояния, Математическое моделирование, 1989, т.1 №2 стр. 64-108.
3. Калиткин Н.Н. Модель квазинезависимых частиц для плазменного микрополя, ДАН, 2008, т.418, в5, с614-618; Козлитин И.А. Моделирование распределение Хольцмарка методом Монте-Карло, Математическое моделирование 2010, т.22, №6 стр.147-156; Белов А.А., Калиткин Н.Н. Валификация моделей микрополя по спектрам плотной, лазерной плазмы, Известия РАН, Серия Физическая, 2021, т.85 №1, с52-58.
4. Feynman R.P., Metropolis N., Teller E. Equation of state of elements based on the generalized Fermi-Thomas theory, Phys. Rev, 1949, Vol75, №10, p.1561-1573.
5. Киржниц Д.А. Квантовые поправки к уравнению Томаса-Ферми, ЖЭТФ, 1957, т32, №1 с115-123; Киржниц Д.А. Экстремальные состояния вещества, УФН, 1971 т104, №3, с489-508.
6. Бурмистров С.Н. Основы статистической физики и физики конденсированного состояния, Издательский Дом Интеллект, 2023, с15-16.
7. Синько Г.В. Расчеты из первых принципов упругих и термодинамических свойств вещества под давлением, Автореферат диссертации на соискание ученой степени д.ф.-м.н., Снежинск, 2006.
8. Никифоров А.Ф., Новиков В.Г., Уваров В.Б. Модифицированная модель Хартри-Фока-Слеттера для вещества с заданной температурой и плотностью. Вопросы атомн. науки и техники: Методики и программы численного решения задач математической физики, 1979г., Вып.4(6) с.16-35.
9. Киржниц Д.А., Лозовик Ю.Е., Шпатаковская Г.В. Статистическая модель вещества УФН, 1975, т.117, №1, с3-47
10. Чандрасекар С. Стохастические проблемы в физике и астрофизике, М. Гос. издат. литературы, 1947г.
11. Крайнов В.П. Модель Хольцмарка для спинового стекла, ФТТ, 2025, т67 в2, стр.285-288.
12. Василевский А.С. Физика твердого тела, ООО Дорфа, 2010г.
13. Борщевский А.В. Физическая Химия Из-во: ХимФак МГУ имени М.В.Ломоносова www.teach-in.ru.