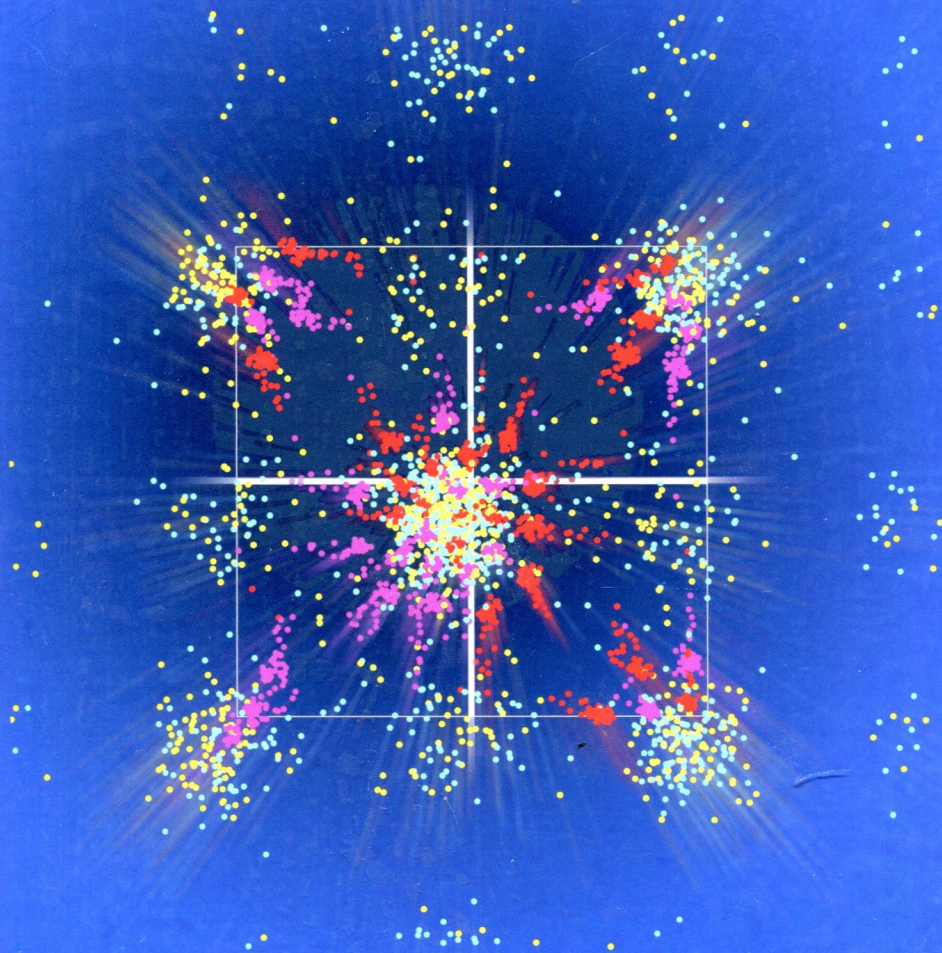


В.Е. Фортов
В.С. Филинов
А.С. Ларкин
В. Эбелинг

Статистическая физика

ПЛОТНЫХ ГАЗОВ
И НЕИДЕАЛЬНОЙ ПЛАЗМЫ



В.Е. Фортвов
В.С. Филинов
А.С. Ларкин
В. Эбелинг

СТАТИСТИЧЕСКАЯ
ФИЗИКА
ПЛОТНЫХ ГАЗОВ
И НЕИДЕАЛЬНОЙ ПЛАЗМЫ



МОСКВА
ФИЗМАТЛИТ®
2020

УДК 533.9.011(031)
ББК 22.333
С 78



Издание осуществлено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований по проекту 20-12-00003, не подлежит продаже

Фортов В.Е., Филинов В.С., Ларкин А.С., Эбелинг В.
Статистическая физика плотных газов и неидеальной плазмы. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2020. — 672 с. — ISBN 978-5-9221-1885-9.

Материал книги основан на университетских лекциях и презентациях на семинарах и международных конференциях, а также на многих оригинальных публикациях и, в частности, на длительном сотрудничестве авторов, которое началось в 1970-е годы.

Книга сконцентрирована на разработке основ и приложений квантовой статистики к газу и плазме, включая плотные неидеальные и экзотические газ и плазму. Это ограничение важно для авторов, поскольку большинство существующих учебников и монографий по квантовой статистике имеют некоторый уклон в область конденсированного вещества и, в частности, твердотельных систем. В книге представлены результаты, полученные совсем недавно.

Книга будет полезна студентам старших курсов, докторантам и молодым исследователям в этой области.

ISBN 978-5-9221-1885-9

© ФИЗМАТЛИТ, 2020

© В.Е. Фортов, В.С. Филинов,
А.С. Ларкин, В. Эбелинг, 2020

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	10
Глава 1. Физика плотных газов, неидеальной плазмы и экстремальных состояний вещества	13
1.1. Теория плотных газов	13
1.2. Физика классических плотных газов	15
1.2.1. Уравнение состояния Ван-дер-Ваальса и взаимодействий	15
1.2.2. Статистическая теория плотного классического газа	19
1.3. Квантовая физика неидеального газа	22
1.3.1. Корреляции в газах Бозе–Эйнштейна и Ферми–Дирака	22
1.3.2. Квантовая статистика взаимодействующих газов	25
1.4. Ионная жидкость и плотная низкотемпературная плазма	27
1.4.1. Кулоновские силы и теория Дебая–Хюккеля–Вигнера	27
1.4.2. Ионизационное и ассоциативное равновесия	30
1.5. Квантовая статистика кулоновских систем	34
1.5.1. Квантовые взаимодействия, экранирование и регуляризация	34
1.5.2. Кулоновские фазовые переходы	42
1.6. Развитие методов численного моделирования	45
1.6.1. Алгоритм Метрополиса	45
1.6.2. Методы Монте-Карло и молекулярной динамики	46
1.7. Теория переноса для неидеальных газа и плазмы	47
1.7.1. Расширение теории Больцмана на плотный газ	47
1.7.2. Кинетическая теория плотной плазмы	48
1.8. Плотные газ и плазма в лаборатории и на Солнце	51
1.8.1. Исследования явлений ионизации	51
1.8.2. Создание жидкостей с экстремально высокой плотностью энергии	55
1.9. Релятивистская плазма и вещество с экстремальной плотностью энергии	62
1.9.1. Релятивистская, субдронная и кварк-глюонная плазма	62
1.9.2. Плазма, созданная пучками релятивистских частиц	68
1.10. Плотные газ и плазма в астрофизике	69
1.10.1. Экстремально высокие плотности энергии в астрофизике	69
1.10.2. Релятивистская плазма в нашей Вселенной	71
Список литературы к гл. 1	77
Глава 2. Сильные корреляции и уравнение состояния плотного газа	83
2.1. Классические функции молекулярного распределения и разложения плотности	83
2.1.1. Функции распределения и соотношения Орнштейна–Цернике	83
2.1.2. Виральные разложения	86

2.2. Методы интегральных уравнений и прототипные системы твердых сфер	86
2.2.1. Уравнение Перкуса-Йевики и гиперцепное уравнение	86
2.2.2. Системы твердых сфер и жидкие смеси	88
2.3. Квантовые эффекты	90
2.3.1. Газы Бозе-Эйнштейна и Ферми-Дирака	90
2.3.2. Разложения плотности с учетом эффектов взаимодействия	91
2.4. Парные корреляции и метод Бета-Уленбека	93
2.4.1. Суммы Слэтера для пар и второй вириальный коэффициент	93
2.4.2. Представление Бета-Уленбека для реальных газов	95
2.5. Представления в большом каноническом ансамбле	97
2.5.1. Разложения по фугативности	97
2.5.2. Разложения по фугативности и химическая картина	99
2.6. Сильные обменные корреляции в газе Ферми-Дирака	102
2.6.1. Парные корреляции и термодинамика	102
2.6.2. Вклады Хартри-Фока	106
2.7. Квантовая статистика прототипного газа Юкавы	110
2.7.1. Теория возмущений для парных операторов плотности	110
2.7.2. Разложений возмущений для свободной энергии	112
2.8. Аналитические свойства термодинамических функций систем Юкавы	114
2.8.1. Связанные состояния и аналитические свойства	114
2.8.2. Точные вириальные коэффициенты и термодинамические функции	118
2.9. Сильно коррелированный бозе-газ при низких температурах	121
2.9.1. Невзаимодействующие бозе-газы	121
2.9.2. Взаимодействующие бозе-газы и фазовые переходы	124
Список литературы к гл. 2	129
Глава 3. Классические кулоновские системы — задачи экранирования	133
3.1. Классические системы с кулоновскими взаимодействиями	133
3.1.1. Дальнодействие кулоновских взаимодействий — экранирование	133
3.1.2. Разложения по плазменному параметру и прототипные модели	137
3.1.3. ОКП плазма и модель ионных сфер	139
3.2. Системы заряженных твердых сфер	143
3.2.1. Приближение Дебая-Хюккеля	143
3.2.2. Среднее сферическое и гиперцепное приближения	144
3.3. Химический потенциал и коэффициенты активности	145
3.3.1. Расчеты свойств индивидуальных ионов	145
3.3.2. Кластерные разложения для твердых заряженных сфер	150
3.3.3. Активности в среднем сферическом приближении	154
3.4. Эффекты ионной ассоциации	156
3.4.1. Слабые эффекты ассоциации в 2-2 электролитах	156
3.4.2. Химическое описание ассоциации ионов — теория Бьеррума	162
3.5. Усовершенствованные модели ионов	164
3.5.1. Потенциалы типа Герни-Фридмана	164
3.5.2. Нелинейная теория Дебая-Хюккеля	166

3.6. Фазовые переходы в классической плазме и ионной жидкости	168
3.6.1. Простые модели переходов в классической жидкости	168
3.6.2. Переходы в классических ионных системах	170
3.7. Коллективные моды в классической плазме	173
Список литературы к гл. 3	176
Глава 4. Квантовые кулоновские системы — связанные состояния и проблемы ионизации	182
4.1. Квантовая теория экранирования Дебая–Хюккеля	182
4.1.1. Квантовое приближение Дебая–Хюккеля	182
4.1.2. Прототипные плазменные модели и приближение приведенной массы (ППМ)	184
4.2. Слэтеровские функции и приближение эффективного потенциала	188
4.2.1. Приближение эффективного потенциала Кельбга–Дейча	188
4.2.2. Дополнение поправками Вигнера–Онзагера	194
4.3. Дополнения коллективных мод	198
4.3.1. Статистическая сумма в коллективных координатах	198
4.3.2. Приложение к однокомпонентной квантовой плазме	200
4.4. Ионизационное равновесие между атомами, электронами и ионами	201
4.4.1. Уравнение Эггерта–Саха для идеальной плазмы	201
4.4.2. Регуляризация атомной статистической суммы	203
4.5. Связанные состояния и ионизационное равновесие в неидеальной плазме	206
4.5.1. Слабо-неидеальные уравнения состояния и уравнение Саха	206
4.5.2. Неидеальность в атомных статистических суммах	209
4.6. Корреляции в плазме благородных газов и щелочной плазме	214
4.6.1. Эффективные потенциалы для плазмы благородных газов и щелочной плазмы	214
4.6.2. Корреляции и термодинамические функции	217
4.7. Фазовые переходы первого рода в ионизованных газах	221
4.7.1. Модели Ван-дер-Ваальса и квантовые эффекты	221
4.7.2. Учет эффектов Кулона и Ван-дер-Ваальса	223
4.8. Приближенная оценка критических точек в КПДХ и ПЭПК	226
4.9. Обсуждение плазменных переходов в теории и эксперименте	229
Список литературы к гл. 4	232
Глава 5. Кулоновские корреляции и уравнение состояния невырожденной неидеальной плазмы	241
5.1. Короткодействующие квантовые эффекты в плазме низкой плотности	241
5.1.1. Парные взаимодействия	241
5.1.2. Потенциал Кельбга	244
5.2. Экранирование в слабо неидеальной плазме	245
5.2.1. Экранированные корреляции в невырожденной плазме	245
5.2.2. Парные корреляции в многокомпонентных системах	247
5.3. Недиagonальные парные операторы плотности	249
5.3.1. Диагональная и недиагональная парная матрица плотности	249
5.3.2. Обсуждение недиагональных эффективных потенциалов	253
5.4. Квантовые поправки в термодинамике	256
5.4.1. Поправки первого порядка к результатам классической ОКП	256
5.4.2. Вклады экранирования высших порядков	258

5.4.3. Экранирование в слабокоррелированных смесях	261
5.5. Вириальное разложение в приближении приведенной массы	263
5.5.1. Свободная энергия и давление в ППМ	263
5.5.2. Совместимость с подходом закона действующих масс	266
5.6. Разложения низкой плотности для кулоновских систем	268
5.6.1. Вириальные разложения для произвольных отношений масс	268
5.6.2. Экранированные кластерные интегралы	269
5.7. Точные кулоновские вириальные функции второго порядка	270
5.7.1. Обменный вклад в кулоновские вириальные функции	270
5.7.2. Прямые вклады в кулоновские вириальные функции	273
5.8. Обсуждение вириальных функций и термодинамических потенциалов	276
5.8.1. Аналитические свойства вириальных функций	276
5.8.2. Вириальное разложение термодинамических функций	278
Список литературы к гл. 5	283
Глава 6. Разложения по фугитивности и связанные состояния в плазме	289
6.1. Разложения по фугитивности термодинамических функций	289
6.1.1. Кластерные разложения в фугитивности	289
6.1.2. Представления фугитивности и уравнение Саха	292
6.2. Комбинации канонических и больших канонических разложений по плотности	296
6.2.1. Структура вкладов низшего порядка в разложении по плотности	296
6.2.2. Структура вкладов высшего порядка	300
6.3. Комбинированные разложения по плотности — фугитивности	301
6.3.1. Частичное суммирование рядов плотности	301
6.3.2. Расширенные представления уравнений состояния нелинейными функциями плотности	305
6.4. Эффекты неидеальности в энергетическом спектре	311
6.4.1. Сдвиги энергии в эффективных волновых уравнениях	311
6.4.2. Давление Хартри–Фока–Вигнера при высокой плотности	318
Список литературы к гл. 6	323
Глава 7. Уравнения состояния сильно связанной частично ионизованной плазмы	327
7.1. Модели кулоновской жидкости и энергия электрического поля	328
7.1.1. Корреляции электрического поля и кулоновская энергия	328
7.1.2. Кулоновская энергия очень плотных электронных жидкостей	331
7.2. Химический потенциал и кулоновская энергия плотных электрон-ионных жидкостей	335
7.2.1. Приближение приведенной массы и другие приближения	335
7.2.2. Эффекты Вигнера при решении гиперцепных уравнений	339
7.3. Кулоновская свободная энергия плотных электрон-ионных жидкостей	344
7.3.1. Основные вклады в кулоновскую свободную энергию	344
7.3.2. Представления Паде кулоновской свободной энергии	345
7.4. Усовершенствованные химические модели, включающие связанные состояния	346
7.4.1. Свободная энергия в химической модели	346

7.4.2. Геометрия ландшафта свободной энергии	354
7.5. Термодинамика плазмы высокого давления.	356
7.5.1. Усовершенствованные химические модели с энергетическими сдвигами	356
7.5.2. Методы минимизации свободной энергии	360
7.6. Водородоподобная и гелиеподобная плазма при сверхвысоких давлениях	364
7.6.1. Водород и дейтерий — адиабаты Гюгоннио и изоэнтропы	364
7.6.2. Плазма гелия и других легких элементов	374
Список литературы к гл. 7	377
Глава 8. Кинетические уравнения и флуктуации в неидеальных газах и плазме	385
8.1. Стохастическая кинетика	385
8.1.1. Уравнение Смолуховского–Фоккера–Планка и управляющее уравнение	385
8.1.2. Стохастическая кинетика Паули и Толмена	390
8.2. Квантовая кинетика и теория переноса	395
8.2.1. Лоренцевская кинетика и релаксационное приближение	395
8.2.2. Квантовая кинетическая теория Боголюбова	397
8.3. Необратимость, энтропия Больцмана и Кульбака. H-теорема.	400
8.3.1. Энтропия и динамика Паули	400
8.3.2. H-теорема	402
8.4. Флуктуационно-диссипативные соотношения	403
8.4.1. Классические соотношения	403
8.4.2. Квантовые флуктуационно-диссипационные соотношения	405
8.5. Флуктуации плазмы и кинетические уравнения.	406
8.5.1. Квантовые корреляции электрического поля	406
8.5.2. Кинетические уравнения и флуктуационно-диссипационные соотношения	408
Список литературы к гл. 8	411
Глава 9. Прыжковая кинетика, квантовая динамика и перенос	415
9.1. Прыжковая кинетика электронов	415
9.1.1. Прыжковая динамика электронов в моделях с сильной связью	415
9.1.2. Динамика Паули прыжков электронов с сильной связью	420
9.2. Временные корреляции и линейный отклик	421
9.2.1. Временные корреляции в приближении сильной связи	421
9.2.2. Теория линейного отклика	423
9.3. Молекулярная динамика с эффективными потенциалами	426
9.3.1. Простые модели эффективных взаимодействий	426
9.3.2. Молекулярная динамика с потенциалами типа Кельбга	427
9.4. Вигнеровская динамика с импульсно-зависимыми потенциалами	429
9.4.1. Взаимодействия, зависящие от импульса	429
9.4.2. Потенциал Дорсо и моделирование плазмы	433
9.5. Молекулярная динамика волновых пакетов	434
9.5.1. Динамика волновых пакетов почти свободных электронов	435
9.5.2. Связанные электроны во внешних полях	440
Список литературы к гл. 9	442

Глава 10. Теоретические подходы к квантовым методам Монте-Карло	447
10.1. Подход интегралов по траекториям к кулоновским системам и задача методов Монте-Карло	447
10.2. Представление термодинамических величин в виде интегралов по траекториям	451
10.3. Методы Монте-Карло и алгоритм Метрополиса–Гастингса	458
10.4. Метод Монте-Карло для интегралов по траекториям	461
10.5. Аналитические исследования матрицы плотности с фиксированными узлами	465
Список литературы к гл. 10	473
Глава 11. Моделирование газо-, жидко- и кристалло-образных состояний кулоновских систем	477
11.1. Парные корреляционные функции, связанные состояния, давление и внутренняя энергия электронно-дырочной плазмы	477
11.2. Термодинамические свойства водородной плазмы	490
11.3. Термодинамические свойства водородо-гелиевых смесей	500
11.4. Кулоновская кристаллизация	507
Список литературы к гл. 11	522
Глава 12. Вигнеровская формулировка для термодинамики	527
12.1. Функция Вигнера в равновесной термодинамике	528
12.2. Представление функции Вигнера в виде интеграла по путям	529
12.3. «Одноимпульсная» функция Вигнера	534
12.4. Линейное и гармоническое приближение	537
12.5. Парный псевдопотенциал для обменного взаимодействия	541
12.5.1. Идеальный газ	541
12.5.2. Учет взаимодействия	549
Список литературы к гл. 12	551
Глава 13. Методы Монте-Карло для функции Вигнера	552
13.1. Методы Монте-Карло и алгоритм Метрополиса–Гастингса	552
13.2. Метод Монте-Карло, основанный на одноимпульсном подходе	556
13.2.1. Вычисление средних значений операторов и функций распределения	561
13.2.2. Периодические граничные условия	563
13.2.3. Подбор параметров и сходимость	564
13.3. Методы Монте-Карло, основанные на линейном и гармоническом приближениях	566
13.3.1. Вычисление физических величин и распределений	570
13.3.2. Подбор параметров и сходимость	572
Список литературы к гл. 13	573
Глава 14. Численное моделирование термодинамики в фазовом пространстве	574
14.1. Одна частица во внешнем поле	574
14.1.1. Одномерный потенциал V_{2-4}	574
14.1.2. Одномерный потенциал V_{3-4}	577
14.1.3. Одномерный потенциал V_{SCC}	580
14.1.4. Трехмерный потенциал V_{2-4}	582
14.2. Идеальный фермионный газ	584

14.2.1. Проверка метода SMPIMC	585
14.2.2. Проверка обменного псевдопотенциала	587
14.3. Двухкомпонентные кулоновские системы	589
14.3.1. Функции распределения по импульсам	590
14.3.2. Внутренняя энергия и давление	593
14.3.3. Парные корреляционные функции	595
Список литературы к гл. 14	598
Глава 15. Приложения к веществам в экстремальных состояниях	600
15.1. Релятивистская статистическая сумма частиц Ньютона–Вигнера в представлении интегралов по траекториям.	600
15.2. Полуклассическая статистическая сумма релятивистской кварк- глюонной плазмы в цветовом представлении интегралов по траек- ториям.	610
15.3. Термодинамика кварк-глюонной плазмы.	622
15.4. Приложение. Интегрирование по мере Хаара группы $SU(3)$	630
Список литературы к гл. 15	632
Глава 16. Транспортные свойства кварк-глюонной плазмы	636
16.1. Вигнеровский подход к квантовой динамике.	636
16.2. Релятивистский квантовый гармонический осциллятор.	647
16.3. Транспортные свойства кварк-глюонной плазмы	657
16.4. Приложение. Дельта-теорема Лебега–Дирака	670
Список литературы к гл. 16	670