сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

Р17 - 12533

А.М.Курбатов

ТОЧНОЕ УРАВНЕНИЕ ДЛЯ ФУНКЦИИ ГРИНА КЛАССИЧЕСКОГО ПЛОТНОГО ЭЛЕКТРОННОГО ГАЗА

1979

P17 - 12533

А.М.Курбатов

ТОЧНОЕ УРАВНЕНИЕ ДЛЯ ФУНКЦИИ ГРИНА КЛАССИЧЕСКОГО ПЛОТНОГО ЭЛЕКТРОННОГО ГАЗА

Р17 - 12533

Курбатов А.М.

Точное уравнение для функции Грина классического плотного электронного газа

В данной работе рассматривается задача классического плотного электронного газа. Анализ проводится на основе теоремы о вариации среднего значения динамической величины в классической статистической механике Боголюбова /мл./-Садовникова. Получено уравнение для основной функции Грина, являющееся асимптотически точным в пределе высоких плотностей электронного газа.

Работа выполнена в Лаборатории нейтронной физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1979

P17 - 12533

Kurbatov A.M.

Exact Equation for Green's Function of Classical Dense Electron Gas

The problem of classical dense electron gas is considered. The analysis is carried out on the basis of the Bogolubov, Jr.,-Sadovnikov theorem on a mean value variation of a dynamical variable. The equation for the main Green function is obtained. This equation is asymptotically exact in the limit of high densities.

The investigation has been performed at the Laboratory of Neutron Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1979

Целью настоящей работы является получение асимптотически точного уравнения для основной функции Грина классического плотного электронного газа

$$H=\sum_{1\le i\le N}\frac{p_i^2}{2m}+\sum_{1\le i<j\le N}\frac{k}{|r_i-r_j|}=\sum_{1\le i\le N}\frac{p_i^2}{2m}+\sum_{1\le i<j\le N}\Phi(r_i-r_j). \qquad /1/$$

Здесь N - число электронов, r_i, p_i - радиус-вектор и импульс i-го электрона, $k=e^2$, e - элементарный заряд. Пусть также β обозначает обратную температуру, $R=V^{1/3}/(4\pi/3)$ - радиус шара, в котором заключен электронный газ.

В работе [4] показано, что рассматриваемая система в пределе

$$N=nN_0,\quad R=n^{-1/3}R_0,\quad \beta=n^{-4/3}\beta_0,\quad n\to\infty \qquad /2/$$

термодинамически эквивалентна системе с гамильтонианом

$$H_0 = \sum_{1\le i\le N} \frac{\underline{p}_i^2}{2m} + \frac{KN}{R}\sum_{1\le i\le N} \bar{\Psi}\left(\frac{1}{R}\underline{z}_i\right) - \frac{K}{2R}\cdot\frac{\int_V \bar{\Psi}\left(\frac{1}{R}\underline{z}\right) e^{-\beta\frac{KN}{R}\bar{\Psi}\left(\frac{1}{R}\underline{z}\right)}\, d\underline{z}}{\int_V e^{-\beta\frac{KN}{R}\bar{\Psi}\left(\frac{1}{R}\underline{z}\right)}\, d\underline{z}}, \qquad /3/$$

где $\bar{\Psi}(\underline{\xi})$ - решение интегрального уравнения

$$\psi(\underline{\xi}) = \frac{\int_{E^3} \frac{K}{|\underline{\xi}-\underline{\eta}|} e^{-\beta\frac{KN}{R}\psi(\underline{\eta})}\, d\underline{\eta}}{\int_{E^3} e^{-\beta\frac{KN}{R}\psi(\underline{\eta})}\, d\underline{\eta}}. \qquad /4/$$

Обозначим теперь совокупность радиус-вектора и импульса посредством

$$X = (\underline{z}, \underline{p}), \qquad /5/$$

а через $\delta(X-Y)$ - шестимерную δ-функцию

$$\delta(X-Y) = \prod_{1\le\alpha\le3} \delta\left(z_X^{(\alpha)} - z_Y^{(\alpha)}\right) \prod_{1\le\alpha\le3} \delta\left(p_X^{(\alpha)} - p_Y^{(\alpha)}\right), \qquad /6/$$

и рассмотрим следующие функции аддитивного, бинарного и вообще S -кратного типа:

$$A_{X_1}(t) = \sum_{1\le i\le N} \delta\left(X_1 - Y_i(t)\right), \qquad /7/$$

$$A_{X_1X_2}(t) = \sum_{1\le i\ne j\le N}{}' \delta\left(X_1 - Y_i(t)\right)\delta\left(X_2 - Y_j(t)\right), \qquad /8/$$

. . . .

$$A_{X_1\ldots X_s}(t) = \sum_{1\le i_1<\ldots<i_s\le N} \delta\left(X_1 - Y_{i_1}(t)\right)\ldots\delta\left(X_s - Y_{i_s}(t)\right). \qquad /9/$$

Статистические средние этих функций являются S -частичными функциями распределения

$$\langle A_{X_1\ldots X_s}(t)\rangle = \left(\frac{N}{V}\right)^S \frac{1}{S!} F_s(t; X_1, \ldots X_s), \qquad /10/$$

$$F_s(t; X_1, \ldots, X_s) = V^{-s}\int \mathcal{D}(t; X_1, \ldots, X_s, X_{s+1}, \ldots, X_N)\, dX_{s+1}\ldots dX_N \qquad /11/$$

Рассмотрим среднее от $A_{X_1X_2}(t)$

$$\langle A_{X_1X_2}(t)\rangle_{H_0} = \sum_{1\le i\ne j\le N} \langle \delta\left(X_1 - Y_i(t)\right)\delta\left(X_2 - Y_j(t)\right)\rangle_{H_0}. \qquad /12/$$

Ввиду аддитивности гамильтониана H_0 по переменным $\underline{z}_i$ и $\underline{p}_i$

при $i \neq j$ имеем

$$\left\langle \delta(X_1 - Y_i(t))\,\delta(X_2 - Y_j(t))\right\rangle_{H_0} =$$

$$= \int \delta(X_1 - Y_i)\,\delta(X_2 - Y_j)\, e^{-\beta\frac{p_i^2}{2m}}\, e^{-\beta\frac{p_j^2}{2m}} \times$$

$$\times e^{-\beta\frac{KN}{R}\bar\Psi\left(\frac{1}{R}z_i\right)}\, e^{-\beta\frac{KN}{R}\bar\Psi\left(\frac{1}{R}z_j\right)}\, dY_i\, dY_j \Big/$$

$$\Big/ \int e^{-\beta\frac{p_i^2}{2m}}\, e^{-\beta\frac{p_j^2}{2m}}\, e^{-\beta\frac{KN}{R}\bar\Psi\left(\frac{1}{R}z_i\right)}\, e^{-\beta\frac{KN}{R}\bar\Psi\left(\frac{1}{R}z_j\right)}\, dY_i\, dY_j, \qquad /13/$$

и среднее произведения $\delta(X_1 - Y_i(t))\,\delta(X_2 - Y_j(t))$ может быть представлено в виде произведения средних

$$\left\langle \delta(X_1 - Y_i(t))\,\delta(X_2 - Y_j(t))\right\rangle_{H_0} =$$

$$= \frac{\int \delta(X_1 - Y_i)\, e^{-\beta\frac{p_i^2}{2m}}\, e^{-\beta\frac{KN}{R}\bar\Psi\left(\frac{1}{R}z_i\right)}\, dY_i}{\int e^{-\beta\frac{p_i^2}{2m}}\, e^{-\beta\frac{KN}{R}\bar\Psi\left(\frac{1}{R}z_i\right)}\, dY_i} \times$$

$$\times \frac{\int \delta(X_2 - Y_j)\, e^{-\beta\frac{p_j^2}{2m}}\, e^{-\beta\frac{KN}{R}\bar\Psi\left(\frac{1}{R}z_j\right)}\, dY_j}{\int e^{-\beta\frac{p_j^2}{2m}}\, e^{-\beta\frac{KN}{R}\bar\Psi\left(\frac{1}{R}z_j\right)}\, dY_j} =$$

$$= \frac{\int \delta(X_1 - Y_i) \prod_{1 \le \ell \le N} \left[e^{-\beta\frac{p_\ell^2}{2m}}\, e^{-\beta\frac{KN}{R}\bar\Psi\left(\frac{1}{R}z_\ell\right)}\, dY_\ell \right]}{\int \prod_{1 \le \ell \le N} \left[e^{-\beta\frac{p_\ell^2}{2m}}\, e^{-\beta\frac{KN}{R}\bar\Psi\left(\frac{1}{R}z_\ell\right)}\, dY_\ell \right]} \times$$

$$\times \frac{\int \delta(X_2 - Y_j) \prod_{1 \le \ell \le N} \left[e^{-\beta\frac{p_\ell^2}{2m}}\, e^{-\beta\frac{KN}{R}\bar\Psi\left(\frac{1}{R}z_\ell\right)}\, dY_\ell \right]}{\int \prod_{1 \le \ell \le N} \left[e^{-\beta\frac{p_\ell^2}{2m}}\, e^{-\beta\frac{KN}{R}\bar\Psi\left(\frac{1}{R}z_\ell\right)}\, dY_\ell \right]} =$$

$$= \left\langle \delta(X_1 - Y_i(t))\right\rangle_{H_0} \left\langle \delta(X_2 - Y_j(t))\right\rangle_{H_0}. \qquad /14/$$

Для среднего $\left\langle A_{X_1X_2}(t)\right\rangle_{H_0}$ получаем представление

$$\left\langle A_{X_1X_2}(t)\right\rangle_{H_0} = \sum_{1 \le i \ne j \le N} \left\langle \delta(X_1 - Y_i(t))\,\delta(X_2 - Y_j(t))\right\rangle_{H_0} =$$

$$= \sum_{1 \le i \ne j \le N} \left\langle \delta(X_1 - Y_i(t))\right\rangle_{H_0} \left\langle \delta(X_2 - Y_j(t))\right\rangle_{H_0} =$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{N} \left\langle \delta(X_1 - Y_i(t))\right\rangle_{H_0} \left\langle \delta(X_2 - Y_j(t))\right\rangle_{H_0} -$$

$$- \sum_{i=1}^{N} \left\langle \delta(X_1 - Y_i(t))\right\rangle_{H_0} \left\langle \delta(X_2 - Y_i(t))\right\rangle_{H_0} =$$

$$= \frac{1}{2} \cdot \sum_{1 \le i \le N} \langle \delta (X_1 - Y_i(t)) \rangle_{H_0} \cdot \sum_{1 \le i \le N} \langle \delta (X_2 - Y_i(t)) \rangle_{H_0} -$$

$$- \sum_{1 \le i \le N} \langle \delta (X_1 - Y_i(t)) \rangle_{H_0} \langle \delta (X_2 - Y_i(t)) \rangle_{H_0} . \qquad /15/$$

В таком случае согласно соотношениям /7/ и /8/

$$\langle A_{X_1 X_2}(t) \rangle_{H_0} = \frac{1}{2} \langle A_{X_1}(t) \rangle_{H_0} \langle A_{X_2}(t) \rangle_{H_0} -$$

$$- \sum_{1 \le i \le N} \langle \delta (X_1 - Y_i(t)) \rangle_{H_0} \langle \delta (X_2 - Y_i(t)) \rangle_{H_0} . \qquad /16/$$

Докажем теперь, что в пределе /2/ вторым слагаемым в /16/ можно пренебречь, т.е., что при $N \to \infty$

$$\langle A_{X_1 X_2}(t) \rangle_{H_0} = \frac{1}{2} \langle A_{X_1}(t) \rangle_{H_0} \langle A_{X_2}(t) \rangle_{H_0} . \qquad /17/$$

Оценим для этого величину $\langle \delta (X - Y(t)) \rangle_{H_0}$:

$$0 \le \langle \delta (X - Y(t)) \rangle_{H_0} =$$

$$= \frac{\int \delta(\underline{r} - \underline{r}') e^{-\beta \frac{KN}{R} \bar{\varphi}(\frac{1}{R} \underline{r}')} d\underline{r}' \int \delta(\underline{p} - \underline{p}') e^{-\beta \frac{p'^2}{2m}} d\underline{p}'}{\int e^{-\beta \frac{KN}{R} \bar{\varphi}(\frac{1}{R} \underline{r})} d\underline{r} \times \int e^{-\beta \frac{p^2}{2m}} d\underline{p}} =$$

$$= \frac{e^{-\beta \frac{KN}{R} \bar{\psi}(\frac{1}{R} \underline{r})}}{\int e^{-\beta \frac{KN}{R} \bar{\psi}(\frac{1}{R} \underline{r})} d\underline{r}} \times \frac{e^{-\beta \frac{p^2}{2m}}}{\int e^{-\beta \frac{p^2}{2m}} d\underline{p}} . \qquad /18/$$

Учитывая, что

$$\bar{\psi}(\underline{\xi}) \ge 0 , \qquad /19/$$

находим

$$0 \le \langle \delta (X - Y(t)) \rangle_{H_0} \le \frac{1}{\int e^{-\beta \frac{KN}{R} \bar{\psi}(\frac{1}{R} \underline{r})} d\underline{r}} \cdot \frac{1}{\int e^{-\beta \frac{p^2}{2m}} d\underline{p}} , \qquad /20/$$

откуда, совершая замену переменной

$$\underline{\xi} = \frac{1}{R} \underline{r} , \qquad /21/$$

получаем

$$0 \le \langle \delta (X - Y(t)) \rangle_{H_0} \le \left[R^3 \int_{E^3} e^{-\beta \frac{KN}{R} \psi(\underline{\xi})} d\underline{\xi} \cdot \left(\frac{2\pi m}{\beta} \right)^{3/2} \right]^{-1} . \qquad /22/$$

Положив здесь

$$N = nN_0, \quad R = n^{-4/3}R_0, \quad \beta = n^{-4/3}\beta_0, \qquad /23/$$

находим

$$0 \leq \langle \delta(X - Y(t)) \rangle_{H_0} \leq \frac{1}{n} \cdot \frac{\beta_0^{3/2}}{(2\pi m R_0)^3} \left[\int_{E^3} e^{-\beta_0 \frac{KN_0}{R_0} \bar{\psi}(\xi)} d\xi \right]^{-1}, \qquad /24/$$

где теперь $\bar{\psi}(\xi)$ есть решение уравнения

$$\psi(\xi) = \frac{\int_{E^3} \frac{K}{|\xi - \zeta|} e^{-\beta_0 \frac{KN_0}{R_0} \psi(\zeta)} d\zeta}{\int e^{-\beta_0 \frac{KN_0}{R_0} \psi(\zeta)} d\zeta} \, . \qquad /25/$$

Таким образом, первое слагаемое в /16/ имеет порядок $O(1)$, а второе - $O\left(\frac{1}{n}\right)$, так что в пределе /2/

$$\langle A_{X_1 X_2}(t) \rangle_{H_0} = \frac{1}{2} \langle A_{X_1}(t) \rangle_{H_0} \langle A_{X_2}(t) \rangle_{H_0} \, , \qquad /26/$$

а поскольку в пределе /2/ имеет место термодинамическая

эквивалентность систем с гамильтонианами H и H_0 /4/, то

$$\langle A_{X_1 X_2}(t) \rangle_H = \frac{1}{2} \langle A_{X_1}(t) \rangle_H \langle A_{X_2}(t) \rangle_H \, . \qquad /27/$$

На основании /10/ для $S = 1, 2$ при $n \to \infty$ получаем

$$F_2(t; X_1, X_2) = F_1(t; X_1) F_1(t; X_2). \qquad /28/$$

Точно так же, как в работе /1/, из того, что /28/ выполняется в пределе $n \to \infty$, можно получить, что расцепление /28/ является асимптотически точным при высоких плотностях электронного газа.

Таким образом, мы показали сейчас, что уравнение Власова /1/, получаемое из цепочки уравнений Боголюбова /2/ с помощью расцепления /28/

$$\frac{\partial F_1(t; X_1)}{\partial t} = [H, F_1(t; X_1)] +$$

$$+ \frac{N}{V} \int [\Phi(\xi_1 - \xi_2), F_1(t; X_1) F_1(t; X_2)] \, dX_2 \qquad /29/$$

является точным в случае высоких плотностей.

Введем теперь в гамильтониан H бесконечно малое возмущение вида

$$\delta H = \exp(-iEt) \sum_{1 \le i \le N} f(x_i) \delta\rho + \exp(iEt) \sum_{1 \le i \le N} f^+(x_i) \delta\rho^+, \qquad /30/$$

так что полный гамильтониан H' можно представить следующим образом:

$$H' = H + \delta H, \qquad /31/$$

где

$$\delta H = U(f) \exp(-iEt) \delta\rho + U(f^+) \exp(iEt) \delta\rho^+, \qquad /32/$$

и

$$U(f) = \sum_{1 \le i \le N} f(x_i). \qquad /33/$$

Чтобы получить уравнение для функции Грина $\langle\langle A_X, A_Y \rangle\rangle_E$, воспользуемся теоремой о вариации среднего значения динамической величины Боголюбова /мл./ - Садовникова [/3/], согласно которой

$$\delta\langle A(t)\rangle = 2\pi \langle\langle A; U(f) \rangle\rangle_E \exp(-iEt) \delta\rho +$$

$$+ 2\pi \langle\langle A; U(f^+) \rangle\rangle_E \exp(iEt) \delta\rho^+, \qquad /34/$$

откуда на основании /10/

$$F_1^{(H')}(t;x) = F_1^{(H)}(t;x) + \delta F_1^{(H)}(t;x), \qquad /35/$$

где

$$\delta F_1(t;x) = 2\pi \frac{V}{N} \{ 2\pi \langle\langle A_x, U(f) \rangle\rangle_E \exp(-iEt) \delta\rho +$$

$$+ \langle\langle A_x, U(f^+) \rangle\rangle_E \exp(iEt) \delta\rho^+ \}. \qquad /36/$$

Подставляя /35/ в /29/ и учитывая, что

$$H' = \sum_{1 \le i \le N} H(t; x_i) + \sum_{1 \le i < j \le N} \Phi(\underline{z}_i - \underline{z}_j), \qquad /37/$$

где

$$H(t;x) = \frac{p^2}{2m} + f(x) \exp(-iEt) \delta\rho + f^+(x) \exp(iEt) \delta\rho^+, \qquad /38/$$

$$\Phi(\underline{z}) = \frac{K}{|\underline{z}|},$$

получаем

$$\frac{\partial\, \delta F_1(t;x_1)}{\partial t} = \left[H(t;x_1), \delta F_1^{(H)}(t;x_1) \right] +$$

$$+ \frac{N}{V} \int \left[\Phi(\underline{z}_1 - \underline{z}_2), F_1^{(H)}(x_1) \delta F_1^{(H)}(t;x_2) + \right.$$

$$+F_1^{(H)}(X_2)\,\delta F_1(t;X_1)\Big]\,dX_2 + \Big[\delta H(t;X_1),\, F_1^{(H)}(X_1)\Big], \qquad /39/$$

где

$$\delta H(t;X) = f(X)\exp(-iEt)\,\delta\rho + f^{+}(X)\exp(iEt)\,\delta\rho^{+}. \qquad /40/$$

На основании /36/ из уравнения /39/ находим

$$-iE\langle\langle A_{X_1}, u(f)\rangle\rangle_E = \Big[\frac{P_1^2}{2m}, \langle\langle A_{X_1}, u(f)\rangle\rangle_E\Big] +$$

$$+\frac{1}{2\pi}\frac{N}{V}\Big[f(X_1), F_1^{(H)}(X_1)\Big] + \frac{N}{V}\int\Big[\Phi(\underline{r}_1 - \underline{r}_2),\, F_1^{(H)}(X_1)\times$$

$$\times\langle\langle A_{X_2}, u(f)\rangle\rangle_E + F_1^{(H)}(X_2)\langle\langle A_{X_1}, u(f)\rangle\rangle_E\Big]\,dX_2\,. \qquad /41/$$

Полагая здесь

$$f(X) = \delta(X - Y), \qquad /42/$$

так что

$$u(f) = A_Y, \qquad /43/$$

получаем окончательно уравнение для основной функции Грина $\langle\langle A_X, A_Y\rangle\rangle_E$:

$$-iE\langle\langle A_{X_1}, A_Y\rangle\rangle_E = \Big[\frac{P_1^2}{2m}, \langle\langle A_{X_1}, A_Y\rangle\rangle_E\Big] +$$

$$+\frac{1}{2\pi}\frac{N}{V}\Big[\delta(X_1 - Y), F_1^{(H)}(X_1)\Big] + \frac{N}{V}\int\Big[\Phi(\underline{r}_1 - \underline{r}_2),$$

$$F_1^{(H)}(X_1)\langle\langle A_{X_2}, A_Y\rangle\rangle_E + F_1^{(H)}(X_2)\langle\langle A_{X_1}, A_Y\rangle\rangle_E\Big]\,dX_2\,, \qquad /44/$$

которое является асимптотически точным в пределе большой плотности электронного газа.

Литература

1. А.А.Власов. Теория многих частиц, Гостехиздат, I950.
2. Н.Н.Боголюбов. Проблемы динамической теории в статистической физике, Гостехиздат, I946.
3. Н.Н.Боголюбов(мл.), Б.И.Садовников. Некоторые вопросы статистической механики, Высшая школа, I975.
4. A.M.Kurbatov. JINR E17-12433, Dubna, 1979.

Рукопись поступила в издательский отдел 8 июня I979 года.