

01

© 1991 г.

К ОПРЕДЕЛЕНИЮ ОПТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК КУЛОНОВСКИХ СИСТЕМ С СИЛЬНЫМ МЕЖЧАСТИЧНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

Г. А. Павлов

Последовательное вычисление оптических характеристик кулоновской системы с сильным межчастичным взаимодействием, представляющей теоретический и практический интерес, невозможно. Поэтому в работе для определения соответствующих функций реакции и временных корреляционных функций неидеальных кулоновских систем использованы явные аппроксимации данных величин с несколькими подгоночными параметрами; причем параметры найдены из известных частотных моментов ФР и ВКФ. Изучены частотные моменты различных динамических характеристик кулоновских систем: поперечной и продольных диэлектрических проницаемостей, коэффициента Кубо, динамического структурного фактора заряд—заряд, а также связанных с ними величин. Коэффициенты отражения и поглощения электромагнитного излучения кулоновской системой, вычисленные с помощью предложенного подхода, сопоставлены с данными коэффициентами, измеренными для ударно-сжатой плазмы Хе и Аг.

Введение

Коэффициенты отражения R_ω , поглощения κ_ω электромагнитного излучения кулоновской системой описываются длинноволновым пределом поперечной диэлектрической проницаемости $\lim_{k \rightarrow 0} \varepsilon^\perp(k, \omega) = \varepsilon^\perp(0, \omega)$ [1]. Мощность электромагнитного излучения, рассеянного кулоновской системой в единицу телесного угла и на единичный интервал частот, определяется, в частности, динамическим структурным фактором электронов $S_e(k, \omega)$ [2]. Последовательное вычисление $\varepsilon^\perp(0, \omega)$ (следовательно, R_ω и κ_ω), $S_e(k, \omega)$ для кулоновской системы с сильным межчастичным взаимодействием, представляющей теоретический и практический интерес, невозможно. Поэтому ниже для определения $\varepsilon^\perp(k, \omega)$, $S_e(k, \omega)$ кулоновских систем с сильным межчастичным взаимодействием использованы явные аппроксимации для данных функции реакции и временной корреляционной функции с несколькими подгоночными параметрами; причем параметры найдены из известных частотных моментов $\varepsilon^\perp(k, \omega)$ и $S_e(k, \omega)$.

Вычисление частотных моментов динамических характеристик кулоновских систем представляет собой сравнительно с вычислением собственно динамических характеристик простую задачу, поскольку сводится к вычислению координатных корреляционных функций таких систем.

В разделе 1 изучены частотные моменты не только $\varepsilon^\perp(k, \omega)$, $S_e(k, \omega)$, но и связанные с ними частотные моменты четырех возможных определений электропроводности кулоновской системы [3, 4]: внешней продольной $\hat{\sigma}^L(k, \omega)$, истинной продольной $\sigma^L(k, \omega)$, поперечной $\sigma^\perp(k, \omega)$ ($\varepsilon^\perp(k, \omega) = 1 + i4\pi \times \times \sigma^\perp(k, \omega) / \omega$) и коэффициента Кубо $\tilde{\sigma}(\omega)$; выявлены важные соотношения между моментами различных динамических характеристик. Аппроксимации $\varepsilon^\perp(0, \omega)$, $S_e(k, \omega)$ соответствуют известным результатам для кулоновских систем со слабым межчастичным взаимодействием, а также содержат правильную низкочастотную асимптотику для $\varepsilon^\perp(0, \omega)$ (см. раздел 2). В заключение R_ω и κ_ω вычисленные с помощью предложенного подхода для классической кулоновской

системы с сильным межчастичным взаимодействием, сопоставлены с коэффициентом отражения лазерного излучения от ударно-сжатой плазмы Xe [5], а также со значениями χ_ω , измеренного для ударно-сжатой плазмы Ar [6].

1. Рассмотрим частотные моменты действительных частей $\hat{\sigma}^L(k, \omega)$, $\sigma^L(k, \omega)$, $\sigma^L(k, \omega)$, $\hat{\sigma}(\omega)$, основное внимание уделяя классическим кулоновским системам [7, 8]. Начнем с $\hat{\sigma}^L(k, \omega)$ — отклика заряженной среды на внешнее продольное электрическое поле [3], в классическом пределе

$$\text{Re } \hat{\sigma}^L(k, \omega) = \frac{e^2}{k^2} \pi^3 \omega^2 \frac{N}{V} S_{\rho\rho}(k, \omega), \quad (1)$$

где $S_{\rho\rho}(k, \omega)$ — динамический структурный фактор заряд—заряд кулоновской системы, симметричный по ω ; N, V — число частиц в системе и ее объем; $\beta = 1/k_B T$, T — температура, e — заряд электрона, k_B — постоянная Больцмана.

В свою очередь $S_{\rho\rho}(k, \omega)$ связан с $S_e(k, \omega)$, $S_i(k, \omega)$, $S_{ei}(k, \omega)$: $S_{\rho\rho}(k, \omega) = (1/2) [S_e(k, \omega) + S_i(k, \omega) - 2S_{ei}(k, \omega)]$. Поэтому в классическом пределе частотные моменты $S_e(k, \omega)$, $\text{Re } \hat{\sigma}^L(k, \omega)$ легко связать между собой; очевидно, в квантовом случае соотношение между частотными моментами данных величин более сложно. Нулевой момент $\text{Re } \hat{\sigma}^L(k, \omega)$, так же как и действительных частей других возможных определений электропроводности кулоновской системы, для классических и квантовых систем с кулоновским взаимодействием равен [3, 4]

$$\left(\hat{\omega}_L^{2n} = \int_{-\infty}^{\infty} \omega^{2n} \text{Re } \hat{\sigma}^L(k, \omega) d\omega \right)$$

$$\hat{\omega}_L^0 = \frac{N}{V} \frac{\pi e^2}{2} \left(\frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_i} \right). \quad (2)$$

Здесь m_e, m_i — массы электрона и иона кулоновской системы. Из (1), (2) легко найти второй момент $S_e(k, \omega)$ кулоновской системы при $\hbar=0$, причем последний соответствует удвоенной электронной части (2); удвоение электронной части (2) для второго момента $S_e(k, \omega)$ следует из нормировки последнего на $1/N$ ($N_e = N/2$). Поясним процедуру вычисления $\hat{\omega}_L^{2n}$. Как следует из (1), частотные моменты $\text{Re } \hat{\sigma}^L(k, \omega)$ сводятся к частотным моментам $S_{\rho\rho}(k, \omega)$. Из свойств пре-

образования Фурье $\int_{-\infty}^{\infty} \omega^{2n} S_{\rho\rho}(k, \omega) d\omega = (1/N) \langle |(\frac{d^n \rho_k(t)}{dt^n})|_{t=0}|^2 \rangle_0$, где $\langle \dots \rangle_0$ означает равновесное усреднение, $\rho_k(t) = \sum_{i=1}^N z_i \exp(-ik \cdot \mathbf{r}_i(t))$ (z_i — зарядовое число i -й частицы, $\mathbf{r}_i(t)$ — ее координата). Проведя дифференцирование $\rho_k(t)$ по t в выражении для частотных моментов $S_{\rho\rho}(k, \omega)$, сгруппировав члены при одинаковых степенях k , применив (1), а также соотношение [9] $\langle (\partial u / \partial x_i) F(\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_N) \rangle_0 = \beta^{-1} \langle \partial F(\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_N) / \partial x_i \rangle_0$ ($u = (1/2) \sum_{i,j} v_{ij}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$, v_{ij} — потенциальная энергия взаимодействия частиц i и j классической двухкомпонентной кулоновской системы), получим для $\hat{\omega}_L^2(\mathbf{k} \parallel \mathbf{x})$

$$\hat{\omega}_L^2 = \frac{3}{2} \frac{N}{V} \pi e^2 k^2 \left(\frac{1}{\beta m_e^2} + \frac{1}{\beta m_i^2} \right) + \frac{N}{V} \pi e^2 \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i,j} \frac{z_i z_j}{m_i m_j} \frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_j} e^{-ik(x_i - x_j)} \right\rangle_0. \quad (3)$$

Индексы i и j , соответствующие как электронам, так и ионам, могут быть равны и не равны между собой; $u = \sum_{i < j} v_{ij} + \sum_{i' < j'} v_{i'j'} + \sum_{i' < j} v_{i'j} + \sum_{i < j'} v_{ij'} + \sum_i v_{ii'}$, последний член в данной сумме (i, j — электроны; i', j' — ионы) в термодинамическом пределе дает в N раз меньший вклад в средние значения, чем остальные. Поэтому усредняемая величина во всех случаях представляется в виде $\sum_{1 \leq k < l \leq N} f(x_k, x_l)$ с определенным численным коэффициентом (так как в (3)

суммирование по i и j производится независимо). Используя известные правила для усреднения такого рода сумм (см., например, [10]), найдем для $\hat{\omega}_L^2$ ($n = N/2V$, $\hat{k} = \mathbf{k}/k$)

$$\begin{aligned} \hat{\omega}_L^2 = & \frac{3}{2} \frac{N}{V} \pi e^2 k^2 \left(\frac{1}{\beta m_e^2} + \frac{1}{\beta m_i^2} \right) + \frac{\pi n^2 e^2}{m_e^2} \left(\int [(\hat{k} \cdot \nabla)^2 v_{ee}(r)] (1 - \cos \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) g_{ee}(r) d\mathbf{r} + \right. \\ & + \int [(\hat{k} \cdot \nabla)^2 v_{ei}(r)] g_{ei}(r) d\mathbf{r} \left. \right) + \frac{2\pi n^2 e^2}{m_e m_i} \int [(\hat{k} \cdot \nabla)^2 v_{ei}(r)] \cos \mathbf{k} \cdot \mathbf{r} g_{ei}(r) d\mathbf{r} + \\ & + \frac{\pi n^2 e^2}{m_i^2} \left(\int [(\hat{k} \cdot \nabla)^2 v_{ii}(r)] (1 - \cos \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) g_{ii}(r) d\mathbf{r} + \int [(\hat{k} \cdot \nabla)^2 v_{ei}(r)] g_{ei}(r) d\mathbf{r} \right). \quad (4) \end{aligned}$$

В (4) $g_{\alpha\beta}(r)$ — парные корреляционные функции [10], четвертый момент $S_e(k, \omega)$ соответствует удвоенному члену $\sim 1/m_e^2$ в (4). Перейдем к вычислению $\hat{\omega}_L^4$ по аналогии с (3)

$$\begin{aligned} \hat{\omega}_L^4 = & \pi e^2 \frac{N}{V} \left\langle \sum_{ij} \frac{z_i z_j}{m_i m_j m_k N} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_k} \frac{\partial^2 u}{\partial x_j \partial x_k} + \frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial y_k} \frac{\partial^2 u}{\partial x_j \partial y_k} + \right. \right. \\ & + \left. \frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial z_k} \frac{\partial^2 u}{\partial x_j \partial z_k} \right) e^{-ik(x_i - x_j)} \left. \right\rangle_0 - \frac{3ik}{\beta} \pi e^2 \frac{N}{V} \left\langle \sum_{ij} \frac{z_i z_j}{m_i m_j^2 N} \frac{\partial^3 u}{\partial x_i \partial x_j^2} e^{-ik(x_i - x_j)} \right\rangle_0 + \\ & + \frac{3ik}{\beta} \pi e^2 \frac{N}{V} \left\langle \sum_{ij} \frac{z_i z_j}{m_i^2 m_j N} \frac{\partial^3 u}{\partial x_i^2 \partial x_j} e^{-ik(x_i - x_j)} \right\rangle_0 + \\ & + \frac{15k^2}{\beta V} \pi e^2 \left\langle \sum_i \frac{z_i^2}{m_i^3} \frac{\partial^2 u}{\partial x_i^2} \right\rangle_0 + 15k^4 \pi e^2 n \left(\frac{1}{m_e^3 \beta^2} + \frac{1}{m_i^3 \beta^2} \right). \quad (5) \end{aligned}$$

В (5) члены $\sim k$ и $\sim k^2$ усреднены аналогично (3), причем член $\sim k$ дает вклад в $\hat{\omega}_L^4$ только при $i \neq j$; член $\sim k^0$ соответствует парной корреляционной функции $g_{\alpha\beta}(r)$, когда $i = j$, $i = j = k$ и свободные индексы в u равны друг другу, $k = j$ и свободный индекс в u равен i , $k = i$ и свободный индекс в u равен j ; в остальных случаях данный член соответствует тройной корреляционной функции $g_{\alpha\beta\gamma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') [11]$

$$\begin{aligned} \hat{\omega}_L^4 = & 15k^4 \pi e^2 n \left(\frac{1}{m_e^3 \beta^2} + \frac{1}{m_i^3 \beta^2} \right) + \frac{\pi e^2}{m_e^2} \left\{ n^3 \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' g_{3e}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') [1 + \cos \mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}') - \right. \\ & - 2 \cos \mathbf{k} \mathbf{r}] (\hat{k} \cdot \nabla) (\hat{k} \cdot \nabla') (\nabla \cdot \nabla') v_{ee}(r) v_{ee}(r') + n^3 \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' g_{eei}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') (1 - 2 \cos \mathbf{k} \mathbf{r}) \times \\ & \times (\hat{k} \cdot \nabla) (\hat{k} \cdot \nabla') (\nabla \cdot \nabla') v_{ee}(r) v_{ei}(r') + n^3 \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' g_{eii}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') (\hat{k} \cdot \nabla) (\hat{k} \cdot \nabla') (\nabla \cdot \nabla') v_{ei}(r) v_{ei}(r') + \\ & + 2n^2 \int d\mathbf{r} g_{ee}(r) (1 - \cos \mathbf{k} \mathbf{r}) (\hat{k} \cdot \nabla \nabla v_{ee}(r))^2 + n^2 \int d\mathbf{r} g_{ei}(r) (\hat{k} \cdot \nabla \nabla v_{ei}(r))^2 \left. \right\} + \\ & + \frac{\pi e^2}{m_e^2 m_i} \left\{ n^3 \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' g_{eei}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cos \mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}') (\hat{k} \cdot \nabla) (\hat{k} \cdot \nabla') (\nabla \cdot \nabla') v_{ei}(r) v_{ei}(r') + \right. \\ & + n^2 \int d\mathbf{r} g_{ei}(r) (\hat{k} \cdot \nabla \nabla v_{ei}(r))^2 \left. \right\} - \frac{\pi e^2}{m_e^2 m_i} \left\{ 2n^3 \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' g_{eei}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') [\cos \mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}') - \cos \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}] \times \right. \\ & \times (\hat{k} \cdot \nabla) (\hat{k} \cdot \nabla') (\nabla \cdot \nabla') v_{ei}(r) v_{ee}(r') - 2n^3 \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' g_{eii}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cos \mathbf{k} \cdot \mathbf{r} (\hat{k} \cdot \nabla) (\hat{k} \cdot \nabla') \times \\ & \times (\nabla \cdot \nabla') v_{ei}(r) v_{ei}(r') - 2n^2 \int d\mathbf{r} g_{ei}(r) \cos \mathbf{k} \cdot \mathbf{r} (\hat{k} \cdot \nabla \nabla v_{ei}(r))^2 \left. \right\} - \\ & - \frac{\pi e^2}{m_e m_i^2} \left\{ 2n^3 \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' g_{eie}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') [\cos \mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}') - \cos \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}] (\hat{k} \cdot \nabla) (\hat{k} \cdot \nabla') (\nabla \cdot \nabla') v_{ei}(r) v_{ii}(r') - \right. \\ & - 2n^3 \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' g_{eii}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cos \mathbf{k} \cdot \mathbf{r} (\hat{k} \cdot \nabla) (\hat{k} \cdot \nabla') (\nabla \cdot \nabla') v_{ei}(r) v_{ei}(r') - 2n^2 \int d\mathbf{r} g_{ei}(r) \times \\ & \times \cos \mathbf{k} \cdot \mathbf{r} (\hat{k} \cdot \nabla \nabla v_{ei}(r))^2 \left. \right\} + \frac{\pi e^2}{m_e m_i^2} \left\{ n^3 \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' g_{eie}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cos \mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}') (\hat{k} \cdot \nabla) (\hat{k} \cdot \nabla') \times \right. \\ & \times (\nabla \cdot \nabla') v_{ei}(r) v_{ii}(r') + n^2 \int d\mathbf{r} g_{ei}(r) (\hat{k} \cdot \nabla \nabla v_{ei}(r))^2 \left. \right\} + k \left\{ \frac{6\pi e^2}{m_e^3 \beta^2} n^2 \int d\mathbf{r} g_{ee}(r) \times \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \times \sin \mathbf{k} \cdot \mathbf{r} (\hat{k} \cdot \nabla)^3 v_{ee}(r) - \frac{6\pi e^2 n^2}{m_e^2 m_i \beta} \int d\mathbf{r} g_{ei}(r) \sin \mathbf{k} \cdot \mathbf{r} (\hat{k} \cdot \nabla)^3 v_{ei}(r) - \frac{6\pi e^2 n^2}{m_e m_i^2 \beta} \int d\mathbf{r} g_{ei}(r) \times \\ & \times \sin \mathbf{k} \cdot \mathbf{r} (\hat{k} \cdot \nabla)^3 v_{ei}(r) \Big\} + 15k^2 \frac{\pi e^2 n^2}{m_e^3 \beta} \int d\mathbf{r} [g_{ee}(r) (\hat{k} \cdot \nabla)^2 v_{ee}(r) + g_{ei}(r) (\hat{k} \cdot \nabla)^2 v_{ei}(r)]. \end{aligned} \quad (6)$$

В (6) для краткости опущены члены $\sim k^0$ с коэффициентом $\pi e^2 m_i^3$, $\sim k$ с коэффициентом $6\pi e^2/m_i \beta$ и $\sim k^2$ с коэффициентом $15\pi e^2/m_e^3 \beta$, которые полностью аналогичны членам с коэффициентами соответственно $\pi e^2/m_e^3$, $6\pi e^2/m_e^2 \beta$, $15\pi e^2/m_e^3 \beta$ при замене $e \rightarrow i$. Шестой момент $S_e(k, \omega)$ соответствует удвоенным членам $\sim 1/m_e^3$ в (6). Последующие четные моменты $\text{Re } \hat{\sigma}^L(k, \omega)$ связаны с более сложными корреляционными функциями $g_\pm(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \mathbf{r}'')$ и т. д. и имеют, очевидно, более громоздкий вид, чем (6).

Определим частотные моменты действительной части $\sigma^L(k, \omega)$ — истинной продольной электропроводности, которая характеризует реакцию заряженной среды на среднее продольное электрическое поле. Данная функция реакции является причинной функцией, т. е. удовлетворяет соотношениям Крамерса—Кронига лишь в длинноволновом пределе [12]. Выразим частотные моменты $\text{Re } \sigma^L(k, \omega) \rightarrow \omega_L^{2n}$ через частотные моменты $\hat{\omega}_L^{2n}$. С этой целью воспользуемся равенством, справедливым при $\omega \rightarrow \infty$: $1 - 4\pi \text{Im } \sigma^L(k, \omega)/\omega = (1 + 4\pi \text{Im } \hat{\sigma}^L(k, \omega)/\omega)^{-1}$ и асимптотическим (при $\omega \rightarrow \infty$) разложением для $\text{Im } \hat{\sigma}^L(k, \omega)$, вытекающим из соответствующего соотношения Крамерса—Кронига

$$\pi \text{Im } \hat{\sigma}^L(k, \omega) = \frac{\hat{\omega}_L^0}{\omega} + \frac{\hat{\omega}_L^2}{\omega^3} + \frac{\hat{\omega}_L^4}{\omega^5} + \dots \quad (7)$$

Разложим правую часть соотношения между $\text{Im } \sigma^L(k, \omega)$ и $\text{Im } \hat{\sigma}^L(k, \omega)$ в ряд по степеням $\text{Im } \hat{\sigma}^L(k, \omega)/\omega$, подставим в данное разложение выражение (7) и сгруппируем члены при одинаковых степенях ω , тогда

$$\pi \text{Im } \sigma^L(k, \omega) = \frac{\hat{\omega}_L^0}{\omega} + \frac{\hat{\omega}_L^2 - 4(\hat{\omega}_L^0)^2}{\omega^3} + \frac{\hat{\omega}_L^4 - 8\hat{\omega}_L^0 \hat{\omega}_L^2 + 16(\hat{\omega}_L^0)^3}{\omega^5} + \dots \quad (8)$$

Используя разложение для $\text{Im } \sigma^L(k, \omega)$, вытекающее из соответствующего соотношения Крамерса—Кронига при $\infty (k \rightarrow 0)$, сравнивая данное разложение с (8), определим четные частотные моменты $\text{Re } \sigma^L(k, \omega)$, равные числителям в разложении (8) [11, 13]. Очевидно, полученные соотношения между $\hat{\omega}_L^{2n}$ и ω_L^{2n} справедливы как для классического, так и для квантового случаев.

Частотные моменты $\varepsilon^\pm(k, \omega)$ тесно связаны с моментами $\sigma^\pm(k, \omega)$, характеризующей отклик заряженной среды на электромагнитное поле. В классическом пределе

$$\text{Re } \sigma^\pm(k, \omega) = \frac{\beta}{2} \Phi_{JJ}^\pm(k, \omega) \frac{1}{V}, \quad (9)$$

поэтому и исходя из свойства преобразования Фурье $\int_{-\infty}^{\infty} \omega^{2n} \Phi_{JJ}^\pm(k, \omega) d\omega =$

$$= 2\pi \langle | (d^n \mathbf{J}_\perp(k, t)/dt^n) |_{t=0} |^2 \rangle_0 \quad (\mathbf{J}_\perp = \mathbf{k} \times \mathbf{J}_k(t); \mathbf{J}_k(t) = e \sum_{i=1}^N z_i \mathbf{v}_i(t) \exp[-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i(t)])$$

практическое вычисление моментов $\text{Re } \sigma^\pm(k, \omega)$ не отличается от вычисления моментов $\text{Re } \hat{\sigma}^L(k, \omega)$. Нулевой момент $\text{Re } \sigma^\pm(k, \omega)$ равен (2), что соответствует с коэффициентом $(4\pi)^{-1}$ первому моменту $\text{Im } \varepsilon^\pm(k, \omega)$. Вычислим ω_\perp^2 по аналогии с (3) ($\mathbf{k} \parallel \mathbf{z}$)

$$\omega_\perp^2 = k^2 \pi e^2 n \left(\frac{1}{\beta m_e^2} + \frac{1}{\beta m_i^2} \right) + \frac{\pi e^2}{V} \left\langle \sum_{ij} \frac{z_i z_j}{m_i m_j} \frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_j} e^{-i\mathbf{k}(x_i - x_j)} \right\rangle_0. \quad (10)$$

Выражение (10) усреднено таким же образом, как и (3); в результате ω_\perp^2 совпадает с (4), если член $\sim k^2$ взять с коэффициентом $1/3$, а в членах $\sim k^0$ опе-

раторы $(\hat{k} \cdot \nabla)^2$ заменить на $(1/2)(\nabla^2 - (\hat{k} \cdot \nabla)^2)$; ω_{\perp}^2 с коэффициентом $(4\pi)^{-1}$ равен третьему моменту $\text{Im } \varepsilon^{\perp}(k, \omega)$. Запишем

$$\begin{aligned} \omega_{\perp}^4 = & k^4 3\pi e^2 n \left(\frac{1}{m_i^3 \beta} + \frac{1}{m_j^3 \beta} \right) + k^2 \frac{\pi e^2}{V \beta} \left\langle \sum_i \frac{1}{m_i^3} \frac{\partial^2 u}{\partial z_i^2} \right\rangle_0 + k^2 \frac{4\pi e^2}{V \beta} \left\langle \sum_i \frac{1}{m_i^3} \frac{\partial^2 u}{\partial x_i^2} \right\rangle_0 - \\ & - ik \frac{3\pi e^2}{\beta V} \left\langle \sum_{ij} \frac{z_i z_j}{m_i^2 m_j} \frac{\partial^3 u}{\partial x_i \partial x_j \partial z_i} e^{-ik(z_i - z_j)} \right\rangle_0 + \\ & + ik \frac{3\pi e^2}{\beta V} \left\langle \sum_{ij} \frac{z_i z_j}{m_i m_j^2} \frac{\partial^3 u}{\partial x_i \partial x_j \partial z_j} e^{-ik(z_i - z_j)} \right\rangle_0 + \frac{\pi e^2}{V} \left\langle \sum_{ijk} \frac{z_i z_j}{m_i m_j m_k} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_k} \frac{\partial^2 u}{\partial x_j \partial x_k} + \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial y_k} \frac{\partial^2 u}{\partial x_j \partial y_k} + \frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial z_k} \frac{\partial^2 u}{\partial x_j \partial z_k} \right) e^{-ik(z_i - z_j)} \right\rangle_0. \end{aligned} \quad (11)$$

После усреднения ω_{\perp}^4 совпадает с (6), если член $\sim k^4$ взять с коэффициентом $1/5$, в членах $\sim k^2$ операторы $15(\hat{k} \cdot \nabla)^2$ заменить на $2(\nabla^2 - (\hat{k} \cdot \nabla)^2) + (\hat{k} \cdot \nabla)^2$, в членах $\sim k$ $6(\hat{k} \cdot \nabla)^3$ — на $3(\nabla^2 - (\hat{k} \cdot \nabla)^2)(\hat{k} \cdot \nabla)$, в членах $\sim k^0$ $2(\hat{k} \cdot \nabla \nabla v(r))^2$ — на $(\nabla \nabla v(r))^2 - (\hat{k} \cdot \nabla \nabla v(r))^2$ и $(\hat{k} \cdot \nabla)(\hat{k} \cdot \nabla')(\nabla \cdot \nabla')$ на $(1/2)((\nabla \cdot \nabla')^2 - (\hat{k} \cdot \nabla) \times (\hat{k} \cdot \nabla')(\nabla \cdot \nabla'))$; четвертый момент $\text{Re } \varepsilon^{\perp}(k, \omega)$ с коэффициентом $(4\pi^{-1})$ равен пятому моменту $\text{Im } \varepsilon^{\perp}(k, \omega)$.

Для определения R_{ω} , κ_{ω} , как указывалось выше, необходим длинноволновый предел $\varepsilon^{\perp}(k, \omega) \rightarrow \varepsilon^{\perp}(0, \omega)$, который совпадает с $\varepsilon(\omega)$ — коэффициентом Кубо, $\varepsilon(\omega) = 1 + i(4\pi/\omega)\tilde{\sigma}(\omega)$. Частотные моменты коэффициента Кубо $\tilde{\sigma}(\omega)$, характеризующего отклик кулоновской системы на внешнее однородное электрическое поле, получены в [4]. Приведем второй и четвертый моменты $\text{Re } \tilde{\sigma}(\omega)$ ($\tilde{\omega}^0$ равен (2))

$$\tilde{\omega}^2 = \frac{\pi e^2}{V} \left\langle \sum_{ij} \frac{z_i z_j}{m_i m_j} \frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_j} \right\rangle_0,$$

$$\tilde{\omega}^4 = \frac{\pi e^2}{V} \left\langle \sum_{ijk} \frac{z_i z_j}{m_i m_j m_k} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_k} \frac{\partial^2 u}{\partial x_j \partial x_k} + \frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial y_k} \frac{\partial^2 u}{\partial x_j \partial y_k} + \frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial z_k} \frac{\partial^2 u}{\partial x_j \partial z_k} \right) \right\rangle_0. \quad (12)$$

После усреднения в классическом пределе моменты (12) совпадут с членами $\sim k^0$ в (4), (6) соответственно, если в последних перейти к пределу $k \rightarrow 0$; соответственно выражение (12) справедливо независимо от типа статистики.

Заметим, что нечетные (четные) частотные моменты $\text{Re } \hat{\sigma}^L(k, \omega)$, $\text{Re } \sigma^L(k, \omega)$, $\text{Re } \sigma^{\perp}(k, \omega)$, $\text{Re } \tilde{\sigma}(\omega)$ ($\text{Im } \hat{\sigma}^L(k, \omega)$, $\text{Im } \sigma^L(k, \omega)$, $\text{Im } \sigma^{\perp}(k, \omega)$, $\text{Im } \tilde{\sigma}(\omega)$) равны нулю как для квантового, так и для классического случаев, поскольку из действительности функций $\hat{\sigma}(\mathbf{r}, t)$, $\sigma(\mathbf{r}, t)$, $\sigma(t)$ следует четность (нечетность) по ω $\text{Re } \hat{\sigma}^L(k, \omega)$ и т. д. ($\text{Im } \hat{\sigma}^L(k, \omega)$ и т. д.).

Сравнение выражений для $\hat{\omega}_L^{2n}$, ω_L^{2n} , ω_{\perp}^{2n} , $\tilde{\omega}^{2n}$ показывает, что данные моменты различны при конечных волновых векторах для классических и квантовых кулоновских систем. Вычисление перечисленных моментов дает конечные результаты. В длинноволновом пределе, как и следовало ожидать, $\hat{\omega}_L^{2n}$ и ω_{\perp}^{2n} совпадают между собой и с $\tilde{\omega}^{2n}$. При этом ($k \rightarrow 0$) вклад в моменты вносят лишь члены, связанные со взаимодействием электронной и ионной подсистем и зависящие для классического случая от принятой модели $v_{ei}(r)$ при $r \rightarrow 0$; электрон-ионное взаимодействие из соображений устойчивости должно быть конечно при $r \rightarrow 0$ [7, 8]. В то же время для квантовой кулоновской системы $v_{ei}(r) \sim 1/r$ при $r \rightarrow 0$. Заметим, что, несмотря на совпадение ω_{\perp}^{2n} , $\tilde{\omega}^{2n}$, $\hat{\omega}_L^{2n}$ при $k \rightarrow 0$, соответствующие электропроводности, вообще говоря, не совпадают. Так, $\lim_{\omega \rightarrow 0} \lim_{k \rightarrow 0} \hat{\sigma}^L(k, \omega) = 0$, но $\lim_{\omega \rightarrow 0} \sigma^{\perp}(0, \omega)$, $\tilde{\sigma}(\omega) = 0$. Предел ω_L^{2n} при $k \rightarrow 0$ не совпадает, как это следует из (8) с соответствующими пределами $\hat{\omega}_L^{2n}$, ω_{\perp}^{2n} , $\tilde{\omega}^{2n}$. Все частотные моменты определяются статическим поведением системы при равновесии, т. е. ее термодинамическими свойствами. Положительность $\hat{\omega}_L^{2n}$, $\tilde{\omega}^{2n}$, ω_{\perp}^{2n} , ω^{2n} накладывает условия на равновесные координатные корреляционные функции $g(r)$, $g_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ и т. д., дополняющие известные интегральные соотношения для $g(r)$ (см., например, [13]).

Кроме положительности, для частотных моментов функций реакции и временных корреляционных функций $-1/\varepsilon^L(k, \omega)$, $\varepsilon^L(k, \omega)$ [3], $\varepsilon^\perp(k, \omega)$, $\varepsilon(\omega)$, соответствующих электропроводностей $S_{pp}(k, \omega)$, $S_e(k, \omega)$ и т. д. справедливы и другие неравенства (ср., например, с [14, 15]). Серия неравенств следует из соотношения Гауха—Шварца

$$\left[\int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \omega^j \operatorname{Im} \chi_{pp}(k, \omega) \right] \left[\int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \omega^k \operatorname{Im} \chi_{pp}(k, \omega) \right] \geq \left[\int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \omega^{(j+k)/2} \operatorname{Im} \chi_{pp}(k, \omega) \right]^2. \quad (13)$$

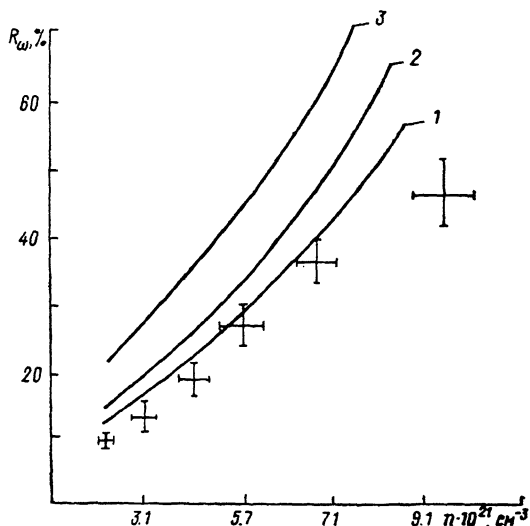
Здесь $\chi_{pp}(k, \omega)$ — функция реакции заряд—заряд: $\operatorname{Im} \chi_{pp}(k, \omega) = N\pi S_{pp}(k, \omega) (1 - \exp(-\beta \omega \hbar)) / \hbar$ [3]. После замены $\operatorname{Im} \chi_{pp}(k, \omega)$ на $\operatorname{Re} \hat{\sigma}^L(k, \omega)$ ($S_{pp}(k, \omega)$ в классическом пределе) из (13) легко получить серию неравенств для $\hat{\omega}_L^{2n}$ и, следовательно, других моментов ($\omega_\perp^{2n}(k=0)$, $\hat{\omega}^{2n}$, ω_L^{2n}), которые имеют место как в случае классической, так и квантовой статистики.

$$\hat{\omega}_L^{2n} \hat{\omega}_L^{2m} \geq (\hat{\omega}_L^{n+m})^2. \quad (14)$$

Неравенство Холдера также независимо от типа статистики дает возможность получить соотношения между частотными моментами в дробных степенях ($f(x)$, $g(x)$ неотрицательны)

Коэффициент отражения лазерного излучения кулоновской системой в сравнении с R_ω ударно-сжатой плазмы Хе.

$\omega = 1.8 \cdot 10^{13} \text{ с}^{-1}$, $T = 30\,000 \text{ К}$, n взято из [8]; 1 — аппроксимация Друда $\hat{\sigma}(\omega) = \hat{\sigma}(0) (1 - i\omega\tau)^{-1}$, 2 — аппроксимация (16), 3 — аппроксимация из [12]; точки — эксперимент [8].



$$\left[\int_a^b f(x) dx \right]^p \left[\int_a^b g(x) dx \right]^q \geq \int_a^b [f(x)]^p [g(x)]^q dx, \quad (15)$$

где $p, q > 0$; $p+q=1$.

Если положить $f(x) = \operatorname{cth}(\beta \omega \hbar / 2) |\operatorname{Im} \chi_{pp}(k, \omega)|$, $g(x) = \omega^3 / \operatorname{Im} \chi_{pp}(k, \omega)$ и взять для (p, q) набор $(2/3, 1/3)$, $(3/4, 1/4)$, $(4/5, 1/5)$, $(3/5, 2/5)$ и т. д., то получим соотношения между частотными моментами в дробных степенях. Еще одна серия неравенств между частотными моментами $\hat{\omega}_L^{2n}$ следует из положительности числителей в правой части (8). Таким образом, из проведенного в разделе 1 анализа видны важные для практических расчетов условия взаимозаменяемости частотных моментов различных динамических характеристик кулоновских систем, которые использованы ниже при определении R_ω , κ_ω кулоновской системы.

2. Восстановление частотного поведения функции по известным частотным моментам, или в случае, рассмотренном в работе, динамических свойств кулоновской системы по ее термодинамическим свойствам — проблема моментов, изучено в [16]. Для решения проблемы необходимо знание, вообще говоря, бесконечного числа частотных моментов, задать которые почти всегда практически невозможно. В [16] даны также рекомендации по восстановлению частотного поведения функции по конечному числу известных частотных моментов (формула Неванлинны). На основании их в [17, 18] найден вариант частотного поведения функций $\sigma^L(k, \omega)$, $\hat{\sigma}^L(k, \omega)$ по конечному числу известных частотных моментов перечисленных функций реакции квантовой кулоновской системы. В настоящей работе использованы явные аппроксимации динамических характеристик кулоновских систем. Так, для $S_e(k, \omega)$ можно рассмотреть аппрокси-

магии двух типов. Первый совпадает с формой $S(k, \omega)$, принятой при анализе рассеяния нейтронов плотными нейтральными средами (см., например, [9]), второй восстановлен по результатам рассеяния электромагнитного излучения газовой плазмой [18]. При расчете $S_e(k, \omega)$ по указанным аппроксимациям в классическом пределе для определения подгоночных параметров целесообразно использовать данные по соответствующим частотным моментам из [19]. Для соблюдения необходимой симметрии по ω для квантовых кулоновских систем следует положить $S_e^{KB}(k, \omega) = \exp(\beta \omega \hbar / 2) S_e^{KL}(k, \omega)$. Экспериментальная проверка предлагаемого способа вычисления $S_e(k, \omega)$ для кулоновских систем с сильным межчастичным взаимодействием невозможна из-за отсутствия измерений рассеяния электромагнитного излучения высокотемпературными конденсированными заряженными средами, но численные данные по $S_{pp}(k, \omega)$ неидеальных классических кулоновских систем удовлетворительно описываются с помощью такого подхода. Для $\epsilon^\perp(0, \omega)$, определяющего согласно соотношениям Френеля [1] R_ω, κ_ω кулоновской системы, рассмотрены аппроксимации двух типов — формула Друдэ [17] и

$$\text{Im } \epsilon^\perp(0, \omega) = \alpha \omega^m \{e^{-(\omega - \omega_0)^2 / \beta^2} - e^{-(\omega + \omega_0)^2 / \beta^2}\}. \quad (16)$$

В (16) α, δ, ω_0 ($m = -2$) — параметры, вычисленные с использованием выражений для $\tilde{\omega}^0, \tilde{\omega}^2$ [17], экстраполированных из области слабого в область сильного межчастичного взаимодействия в квантовой кулоновской системе; кроме того, полагалась известной величина $\tilde{\epsilon}(0)$ [7, 8, 19], обеспечивающая необходимую низкочастотную асимптотику $\epsilon^\perp(0, \omega)$. По соотношению Крамерса—Кронига из (16) получено $\text{Re } \epsilon^\perp(0, \omega)$. Подобная (16) Гауссова форма $\text{Im}(1/\epsilon^\perp(0, \omega))$ применена в [20] для определения ϵ . Расчет R_ω, κ_ω по аппроксимации Друдэ требует знания лишь $\tilde{\omega}^0$ и $\tilde{\epsilon}(0)$. На рисунке сопоставлены \tilde{R}_ω , вычисленные по предложенному в работе методу, с данными [5], описывающими отражение лазерного излучения ударно-сжатой плазмой Хе. Отличие данных [5] от R_ω , определенного по (16), связано, по-видимому, с недостаточно хорошими экстраполяционными свойствами выражения $\tilde{\omega}^2$ из [17] в области кулоновских систем с сильным межчастичным взаимодействием. Расчеты по (16) показывают также удовлетворительное (в пределах $\sim 20\%$) совпадение κ_ω с измерениями [6] для ударно-сжатой плазмы Аг. В заключение заметим, что выполненное исследование, в частности, обосновывает применимость кулоновской системы [7, 8, 19] в качестве модели для высокотемпературных конденсированных сред.

Список литературы

- [1] Гинзбург В. Л. Распространение электромагнитных волн в плазме. М.: Наука, 1967.
- [2] Шеффилд Дж. Рассеяние электромагнитного излучения в плазме. М.: Атомиздат, 1978.
- [3] Лайнс Д., Нозьер Ф. Теория квантовых жидкостей. М.: Мир, 1967.
- [4] Kubo R. // Rep. Progr. Phys. 1966. Vol. 29. Pt 1. P. 255—284.
- [5] Запорожец Ю. Б., Фортвов В. Е., Батовский О. М., Минцев В. Б. // Письма ЖТФ. 1984. Т. 10. Вып. 21. С. 1339—1343.
- [6] Беспалов В. Е., Грязнов В. К., Фортвов В. Е. // ЖЭТФ. 1979. Т. 76. Вып. 1. С. 140—147.
- [7] Vas M., Hansen J.-P. // Phys. Rep. A. 1980. Vol. 59. N 1. P. 1—67.
- [8] Rovere M., Tosi M. P. // Rep. Progr. Phys. 1986. Vol. 49. N 9. P. 1001—1081.
- [9] Kugler A. A. // J. Stat. Phys. 1973. Vol. 8. N 2. P. 107—153.
- [10] Фишер И. Э. Статистическая теория жидкостей. М.: Физматгиз, 1961.
- [11] Павлов Г. А., Карахтанов В. С. Препринт ОИХФ АН СССР. Черноголовка, 1987.
- [12] Киржниц Д. А. // УФН. 1987. Т. 152. № 3. С. 399—422.
- [13] Теплофизические свойства рабочих сред газофазного ядерного реактора / Под ред. В. М. Иевлева. М.: Атомиздат, 1980.
- [14] Iwamoto N. // Phys. Rev. A. 1986. Vol. 33. N 3. P. 1940—1951.
- [15] Martin Ph. // A. Rev. Mod. Phys. 1988. Vol. 60. N 4. P. 1075—1127.
- [16] Ахизер Н. И. Классическая проблема моментов и некоторые вопросы анализа, связанные с нею. М.: Физматгиз, 1961.
- [17] Адамьян В. М., Майер Г., Ткаченко И. М. // Физика плазмы. 1985. Т. 11. № 7. С. 826—835.
- [18] Salpeter E. E. // Phys. Rev. 1960. Vol. 120. N 5. P. 1528—1539.
- [19] Hansen J.-P., McDonald I. R. // Phys. Rev. A. 1981. Vol. 23. N 4. P. 2041—2059.
- [20] Gaut M. // J. Phys. C. 1985. Vol. 18. N 13. P. 2691—2696.