

мирования ряда (7) нашим методом — кривая I и точное решение (8) — кривая II.

Итак, во всех разобранных задачах имеет место согласие между решениями, полученными в рамках нашего метода, и точными решениями.

Литература

1. Белокуров В.В., Соловьев Ю.П., Шавгулидзе Е.Т., Юдин И.Л. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2001. № 1. С. 3 (Moscow University Phys. Bull. 2001. No 1. P. 1).
2. Попов В.С., Елецкий В.Л., Турбинер А.В. // ЖЭТФ. 1978. 74. С. 445; Ядерная физика. 1978. 28, №4(10). С. 1109.
3. Белокуров В.В., Соловьев Ю.П., Шавгулидзе Е.Т. // Фундамент. и прикл. матем. 1999. 5, № 2. С. 363; ТМФ. 2000. 123, № 3. С. 452.

4. Bender C.M., Wu T.T. // Phys. Rev. 1969. 184. P. 1231.
5. Hioe F.T., MacMillen D., Montroll E.V. // Phys. Reports. 1978. C43. P. 306.
6. Попов В.С. // Ядерная физика. 1970. 12. С. 429; ЖЭТФ. 1971. 60. С. 1228.
7. Schwinger J. // Phys. Rev. 1951. 82. P. 664.
8. Рутыс В.И. // Тр. ФИАН. 1986. 168. С. 5.
9. Мигдал А.Б., Попов В.С., Воскресенский Д.Н. // Письма в ЖЭТФ. 1976. 24. С. 186.
10. Лунатов Л.Н. // Письма в ЖЭТФ. 1976. 24. С. 179; ЖЭТФ. 1976. 71. С. 2010.

Поступила в редакцию
14.06.00

УДК 533, 536, 538.9

АНАЛИЗ АДДИТИВНОСТИ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОЙ И ТВЕРДОСФЕРНОЙ СОСТАВЛЯЮЩИХ В УРАВНЕНИИ СОСТОЯНИЯ ОДНОКОМПОНЕНТНОЙ ПЛАЗМЫ ТВЕРДЫХ СФЕР

Н. В. Бриллиантов, В. В. Малинин

(кафедра полимеров и кристаллов)

E-mail: malinine@polly.phys.msu.su

Показано, что представление свободной энергии однокомпонентной плазмы твердых сфер в виде суммы свободной энергии системы твердых сфер и энергии однокомпонентной плазмы справедливо в случае малых значений коэффициента упаковки или при достаточно больших значениях плазменного параметра Γ .

Введение

Модель однокомпонентной плазмы (ОКП) является одной из базовых моделей, применяемых, например, в астрофизике, теории металлов, физической химии [1–4]. Эта модель определяется как система одинаково заряженных точечных частиц, взаимодействующих посредством кулоновского потенциала и помещенных в однородный бесструктурный компенсирующий фон, заряженный противоположно и обеспечивающий электронейтральность системы [1, 2]. В целях более адекватного описания многих реальных систем необходимо учитывать конечные размеры частиц. Модель однокомпонентной плазмы с твердыми сферами (ОКПТС) относится к классу так называемых примитивных моделей, широко используемых в теоретических исследованиях расплавов солей [5], растворов электролитов [6], жидких металлов [7, 8] и суспензий заряженных коллоидных частиц [9, 10].

Модель ОКПТС изучалась в численных экспериментах методом Монте-Карло [11, 12], а также путем численного решения интегральных уравнений (гиперцепного и Перкуса–Йевики) [13], в рамках средне-сферического приближения и с помощью кластерного разложения [14, 15]. Однако применение этих ме-

тодов в теоретических исследованиях затруднительно в связи с их трудоемкостью, поэтому часто используется представление термодинамических потенциалов ОКПТС в виде суммы потенциалов системы твердых сфер и однокомпонентной плазмы (см., напр., [12, 16]).

Исследование обоснованности представления свободной энергии ОКПТС в виде суммы свободной энергии системы твердых сфер и свободной энергии ОКП путем сравнения уравнения состояния ОКП [17] и уравнения состояния ОКПТС, полученного в настоящей работе, показало, что такое представление справедливо при достаточно больших значениях плазменного параметра $\Gamma = l_B/a_c$, где $l_B = e^2/(k_B T)$ — длина Беррума (e — заряд частицы, k_B — константа Больцмана, T — температура), $a_c = (3/(4\pi\rho))^{1/3}$ — радиус ионной сферы и $\rho = N/\Omega$ — плотность частиц (N — число частиц, Ω — объем системы), либо при малых значениях коэффициента упаковки $\eta = (\pi/6)\rho d^3$ (d — диаметр твердых сфер). Степень неаддитивности (относительная ошибка такого представления) не превышает 10% в случае $\Gamma > 20$ либо $\eta < 0.02$, но может достигать 40% и более при $\Gamma < 4$ и при $\eta > 0.1$.

Уравнение состояния для ОКПТС

Рассмотрим гамильтониан ОКПТС, опустив в нем часть, соответствующую идеальному газу:

$$H = \frac{1}{2} \beta^{-1} \sum_{\mathbf{k}}^{(-)} \nu_{\mathbf{k}} (\rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \rho) + H_{hc}, \quad (1)$$

где $\beta^{-1} = k_B T$. Первый член в правой части (1) соответствует кулоновскому взаимодействию, выраженному в коллективных переменных $\rho_{\mathbf{k}} = \left(1/\sqrt{\Omega}\right) \sum_{j=1}^N e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_j}$, где \mathbf{r}_j — координаты j -й частицы, $\nu_{\mathbf{k}} = 4\pi l_B/k^2$ и H_{hc} отвечает взаимодействию твердых сфер. Суммирование в (1) производится по волновым векторам $\mathbf{k} = \{k_x, k_y, k_z\}$, где $k_i = 2\pi l_i/L$ ($i = x, y, z$), l_i — целые числа, $L^3 = \Omega$, а минус у знака суммы обозначает отсутствие в ней члена с $\mathbf{k} = 0$, который сокращается с членами, описывающими самовоздействие компенсирующего фона и его взаимодействие с частицами.

Конфигурационный интеграл можно записать следующим образом [18–20]:

$$Q = \left\langle \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}}^{(-)} \nu_{\mathbf{k}} (\rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \rho) \right\} \right\rangle_R Q_R, \quad (2)$$

где Q_R — конфигурационный интеграл базисной системы твердых сфер и $\langle (\dots) \rangle_R = Q_R^{-1} \int d\mathbf{r}^N (\dots)$ обозначает усреднение по базисной системе. В соответствии со схемой Хаббарда–Скофилда [18], т. е. используя тождество

$$\exp \left(-\frac{1}{2} a^2 x^2 \right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi a^2}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left(-\frac{1}{2} \frac{y^2}{a^2} + ixy \right) dy,$$

преобразуем конфигурационный интеграл Q к виду [19, 20]

$$Q = Q_R \int \prod_{\mathbf{k}}^{(-)} c_{\mathbf{k}} d\varphi_{\mathbf{k}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}}^{(-)} \nu_{\mathbf{k}}^{-1} \varphi_{\mathbf{k}} \varphi_{-\mathbf{k}} \right\} \times \left\langle \exp \left\{ i \sum_{\mathbf{k}}^{(-)} \rho_{\mathbf{k}} \varphi_{-\mathbf{k}} \right\} \right\rangle_R,$$

где $c_{\mathbf{k}} = (2\pi\nu_{\mathbf{k}})^{-1/2} \exp\{\nu_{\mathbf{k}}\rho/2\}$ и интегрирование производится при условии $\varphi_{-\mathbf{k}} = \varphi_{\mathbf{k}}^*$ (звездочкой обозначено комплексное сопряжение). Применяя кумулянтное разложение для $\left\langle \exp \left\{ i \sum_{\mathbf{k}}^{(-)} \rho_{\mathbf{k}} \varphi_{-\mathbf{k}} \right\} \right\rangle_R$ [21], получаем

$$Q = Q_R \int \prod_{\mathbf{k}}^{(-)} c_{\mathbf{k}} d\varphi_{\mathbf{k}} \exp\{-H\} \quad (3)$$

с эффективным гамильтонианом H , определяемым соотношениями

$$H = \sum_{n=2}^{\infty} \Omega^{1-n/2} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n}^{(-)} u_n(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n) \varphi_{\mathbf{k}_1} \dots \varphi_{\mathbf{k}_n},$$

где

$$u_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = \frac{1}{2} \delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, 0} \left\{ \frac{k_1^2}{4\pi l_B} + \langle \rho_{\mathbf{k}_1} \rho_{\mathbf{k}_2} \rangle_{cR} \right\},$$

$$u_n(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n) = -i^n \frac{\Omega^{n/2-1}}{n!} \langle \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_n} \rangle_{cR}, \quad n > 2.$$

Здесь $\langle \dots \rangle_{cR}$ обозначает кумулянтное среднее, вычисленное для базисной системы. Дальнейшее рассмотрение будет проводиться в гауссовом приближении для эффективного гамильтониана, в котором опущены все члены выше второй степени по полевой переменной φ . Кумулянтное среднее $\langle \rho_{\mathbf{k}_1} \rho_{\mathbf{k}_2} \rangle_{cR}$ может быть выражено через фурье-образ прямой корреляционной функции базисной системы $\tilde{c}_2(\mathbf{k})$ [22]:

$$\langle \rho_{\mathbf{k}_1} \rho_{\mathbf{k}_2} \rangle_{cR} = \rho(1 - \rho \tilde{c}_2(\mathbf{k}))^{-1}.$$

Раскладывая $\tilde{c}_2(\mathbf{k})$ в ряд $\tilde{c}_2(\mathbf{k}) = \tilde{c}_2(0) - \tilde{c}_2(k)''k^2 + \dots$, выразим $\tilde{c}_2(0)$ через приведенную сжимаемость базисной системы твердых сфер $Z_0 = \rho k_B T \chi_R$:

$$\rho \tilde{c}_2(0) = 1 - 1/Z_0$$

(см., напр., [20]). Для системы твердых сфер известно весьма точное уравнение состояния Карнаха–Старлинга [23]:

$$\frac{\beta F_{ex, hc}}{N} = \frac{4\eta - 3\eta^2}{(1 - \eta)^2}, \quad (4)$$

из которого с помощью двукратного дифференцирования по плотности получаем $Z_0 = (1 - \eta)^4 (1 + 4\eta + 4\eta^2 - 4\eta^3 + \eta^4)^{-1}$. По определению

$$\begin{aligned} \tilde{c}_2(0)'' &= \frac{1}{6} \int r^2 c_2(r) dr = \\ &= -(\pi d^5/120)(16 - 11\eta + 4\eta^2)(1 - \eta)^{-4}, \end{aligned}$$

где при вычислении второго момента $c_2(r)$ было использовано аналитическое решение Вертгейма–Тъеля уравнения Перкуса–Йевики для прямой корреляционной функции [24, 25].

Проводя (гауссово) интегрирование по переменным $\varphi_{\mathbf{k}}$ [17] в (3), приходим к следующему уравнению для избыточной свободной энергии:

$$-\beta F_{ex} = \ln Q = \beta F_{ex, hc} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}}^{(-)} [\alpha_{\mathbf{k}} - \ln(\alpha_{\mathbf{k}} Z_0 + \Theta)], \quad (5)$$

где $\alpha_{\mathbf{k}} = 4\pi l_B \rho/k^2$, $\Theta = 1 - 4\pi l_B (\rho Z_0)^2 \tilde{c}_2''(0)$. Первый член в правой части (5) представляет собой избыточную свободную энергию системы твердых сфер

$F_{\text{ex,hc}}$, а второй отвечает электростатической составляющей свободной энергии. Заменяя в (5) суммирование по волновым векторам на интегрирование, необходимо учесть, что полное число степеней свободы $3N$ должно быть равно полному числу физические различных мод [17]. Поэтому интегрирование в \mathbf{k} -пространстве следует проводить внутри сферы радиуса k_0 , для которого можно получить оценку $k_0 = (9\rho\pi^2)^{1/3}$ [17]. Учитывая все сказанное выше, приходим к следующему выражению для избыточной свободной энергии ОКПТС:

$$\frac{F_{\text{ex,hcoep}}}{k_B T N} = \frac{F_{\text{ex,hc}}}{k_B T N} + \frac{3}{4} \left[\ln(\Theta + b\Gamma Z_0) - b\Gamma \left(3 - \frac{2Z_0}{\Theta} \right) \right] - \frac{3}{2} \left(\frac{b\Gamma Z_0}{\Theta} \right)^{3/2} \text{arctg} \left(\sqrt{\frac{\Theta}{b\Gamma Z_0}} \right), \quad (6)$$

где $b = \frac{2}{3} \left(\frac{2}{\pi^2} \right)^{1/3}$, избыточная свободная энергия $F_{\text{ex,hc}}$ задана соотношением (4), а константа Θ зависит от коэффициента упаковки η как функция Z_0 и $\tilde{c}_2(0)''$, определенных выше:

$$\Theta = 1 + \frac{6}{5} \left(\frac{e^2}{dk_B T} \right) \frac{\eta^2(1-\eta)^4(16-11\eta+4\eta^2)}{(1+4\eta+4\eta^2-4\eta^3+4\eta^4)^2}.$$

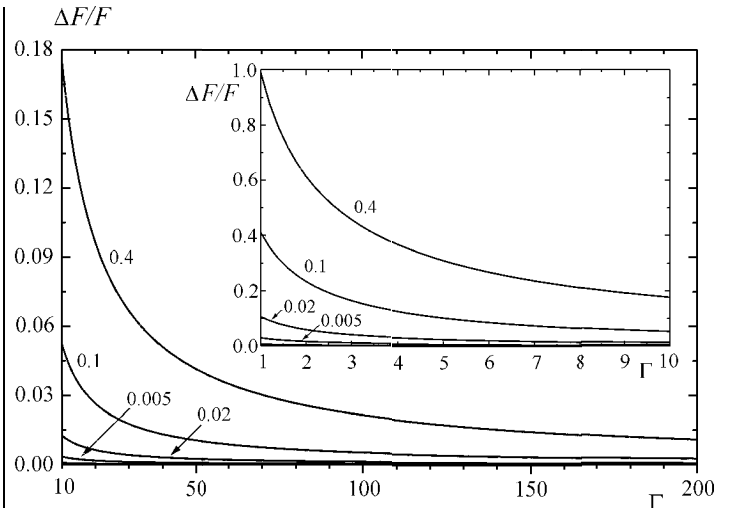
Из уравнения (6) легко получить аналитическое выражение для внутренней энергии $U_{\text{ex}} = \Gamma \partial F_{\text{ex}} / \partial \Gamma$ и сравнить его с результатами численных экспериментов методом Монте-Карло (этот метод не позволяет непосредственно получать значения F_{ex}). В работе [26] показано, что аналитические результаты воспроизводят «экспериментальные» с точностью 1–3% практически во всем диапазоне параметров Γ и η (максимальное отклонение, равное примерно 12%, наблюдалось в области низкой точности метода Монте-Карло). Это позволяет использовать полученное уравнение состояния для анализа адекватности упрощающих приближений.

В литературе широко применяется приближение аддитивности твердосферной и электростатической составляющих свободной энергии, причем для последней используется свободная энергия ОКП, т. е. системы точечных частиц (см., напр., [12, 16]). Для анализа обоснованности применения этого приближения введем степень неаддитивности указанных составляющих:

$$\Delta F/F = [F_{\text{ex,hcoep}} - (F_{\text{ex,hc}} + F_{\text{ex,оep}})] / F_{\text{ex,оep}}, \quad (7)$$

которая характеризует влияние исключенного объема (т. е. взаимодействий твердых сердцевин) на электростатическую составляющую свободной энергии. Для $F_{\text{ex,оep}}$ используем уравнение состояния ОКП [17]:

$$\frac{F_{\text{ex,оep}}}{k_B T N} = \frac{3}{4} [\ln(1 + b\Gamma) - b\Gamma] - \frac{3}{2} (b\Gamma)^{3/2} \text{arctg} \left(\frac{1}{\sqrt{b\Gamma}} \right).$$



Степень неаддитивности (7) избыточной свободной энергии ОКПТС в зависимости от величины плазменного параметра Γ для разных значений коэффициента упаковки η (цифры при кривых). На вставке показаны те же кривые, но в большем масштабе по Γ

Зависимость степени неаддитивности свободной энергии ОКПТС от плазменного параметра Γ для разных значений коэффициента упаковки η (рисунок) показывает, что представление свободной энергии ОКПТС в виде суммы свободной энергии системы твердых сфер и свободной энергии ОКП справедливо при $\Gamma > 20$ или при $\eta < 0.02$ (степень неаддитивности не превышает $\sim 10\%$) и точность его повышается с увеличением плазменного параметра Γ либо с уменьшением коэффициента упаковки η (степень неаддитивности не превышает $\sim 3\%$ при $\Gamma > 80$ или при $\eta < 0.005$). В противоположном случае малых Γ ($\Gamma < 4$) и больших η ($\eta > 0.1$) точность этого приближения снижается и с ростом η ошибка приближения (т. е. степень неаддитивности) может достигать 40% и более. Очевидно, что в этом случае следует применять выражение (6) либо проводить более полный учет взаимодействия твердых сфер иными способами.

Литература

1. Baus M., Hansen J.P. // Phys. Reports. 1980. **59**. P. 1.
2. Ichimaru S., Iyetomi H., Tanaka S. // Phys. Reports. 1987. **149**. P. 91.
3. Young D.A., Corey E.M., DeWitt H.E. // Phys. Rev. 1991. **A44**. P. 6508.
4. Stevens M.J., Robbins M.O. // Europhys. Lett. 1990. **12**, No. 1. P. 81.
5. Hafskjold B., Stell G. // Studies in Statistical Mechanics. V. 8. The Liquid State of Matter. North-Holland, Amsterdam, 1982.
6. Outhwaite C.W. // Statistical Mechanics. V. 2, A Specialist Periodical Report. Chemical Society, London, 1975.
7. Hayter J.B., Pynn R., Suck J.B. // J. Phys. F. 1983. **13**. L1.
8. Singh H.B., Holz A. // Phys. Rev. 1983. **A28**. P. 1108.
9. Belloni L. // J. Chem. Phys. 1988. **88**. P. 5143.

10. Caccamo C. // J. Chem. Phys. 1989. **91**. P. 4902.
11. Metropolis N., Rosenbluth A.W., Rosenbluth M.N. et. al. // J. Chem. Phys. 1953. **21**. P. 1087.
12. Penfold R., Nordholm S., Jonsson B. et. al. // J. Chem. Phys. 1991. **95**. P. 2048.
13. Lado F. // Mol. Phys. 1976. **31**. P. 1117.
14. Anderson H.C., Chandler D. // J. Chem. Phys. 1972. **57**. P. 1918.
15. Verlet L., Weis J.J. // Mol. Phys. 1974. **28**. P. 665.
16. Levin Y., Barbosa M.C., Tamashiro M.N. // Europhys. Lett. 1998. **41**, No. 2. P. 123.
17. Brilliantov N.V. // Contrib. Plasma Phys. 1998. **38**, No. 4. P. 489.
18. Hubbard J., Schofield P. // Phys. Lett. 1972. **A40**, No. 3. P. 245.
19. Brilliantov N.V., Valleau J.P. // J. Chem. Phys. 1998. **108**. P. 1123.
20. Brilliantov N.V. // Phys. Rev. 1998. **E58**. P. 2628.
21. Kubo R. // J. Phys. Soc. Japan. 1962. **17**. P. 1100.
22. Gray C.G., Gubbins K.E. Theory of Molecular Fluids. Clarendon, Oxford, 1984.
23. Carnahan N.F., Starling K.E. // J. Chem. Phys. 1969. **51**. P. 635.
24. Wertheim M.S. // Phys. Rev. Lett. 1963. **10**, No. 8. P. 321.
25. Thiele E. // J. Chem. Phys. 1963. **39**. P. 474.
26. Brilliantov N.V., Malinina V.V. In press.

Поступила в редакцию
06.10.00

УДК 517.958:519.632.4

СМЕШАННАЯ ЗАДАЧА ФИЗИКИ ЗАМАГНИЧЕННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ ВО ВНЕШНЕЙ ОБЛАСТИ

А. О. Чикилев, П. А. Крутицкий

(кафедра математики)

E-mail: chikilev@afrodita.phys.msu.su

Рассматривается смешанная задача для уравнения Лапласа во внешней многосвязной области с границей, состоящей из простых замкнутых кривых. На некоторых кривых задается условие Дирихле, на остальных — условие с косой производной. Задача сведена к однозначно разрешимому интегральному уравнению Фредгольма второго рода в пространстве непрерывных функций. Доказано, что решение задачи существует и единственно.

1. Постановка задачи. Теорема единственности

Рассмотрим на плоскости $x = (x_1, x_2) \in R^2$ открытую связную внешнюю область D^{ext} с границей Γ . Считаем, что контур Γ состоит из простых гладких замкнутых кривых: $\Gamma_1^1, \dots, \Gamma_{N_1}^1$; $\Gamma_1^2, \dots, \Gamma_{N_2}^2$, не имеющих общих точек, где $N_1 \geq 1$ и $N_2 \geq 0$. Пусть \mathbf{n}_x — вектор внутренней по отношению к области D^{ext} нормали к Γ в точке $x \in \Gamma$, а $\boldsymbol{\tau}_x$ — вектор касательной к Γ в той же точке, указывающий положительное направление обхода области D^{ext} по Γ , такое, чтобы при обходе область D^{ext} оставалась справа. Положим $\Gamma^1 = \bigcup_{n=1}^{N_1} \Gamma_n^1$, $\Gamma^2 = \bigcup_{n=1}^{N_2} \Gamma_n^2$. Тогда $\Gamma = \Gamma^1 \cup \Gamma^2$. Будем считать, что Γ^1 состоит из ляпуновских кривых, т.е. $\Gamma^1 \in C^{1,\lambda}$ для некоторого $\lambda \in (0, 1]$, а $\Gamma^2 \in C^{2,0}$. Рассмотрим задачу в области D^{ext} для уравнения Лапласа.

Внешняя задача S^{ext} . Найти гармоническую в D^{ext} функцию $u(x) \in C^2(D^{\text{ext}}) \cap C^0(\overline{D^{\text{ext}}})$, удовлетворяющую граничным условиям

$$u(x)|_{\Gamma^1} = f_1(x), \quad (1)$$

$$\frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}_x} + \beta \frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{\tau}_x} \Big|_{\Gamma^2} = f_2(x), \quad \beta = \text{const}, \quad (2)$$

и условиям на бесконечности

$$\begin{aligned} |u(x)| \leq C_1, \quad |\nabla u(x)| \leq C_2|x|^{-2}, \\ |x| = \sqrt{x_1^2 + x_2^2} \rightarrow \infty, \end{aligned} \quad (3)$$

где C_1, C_2 — некоторые константы.

Поясним, в каком смысле понимается граничное условие (2). В задаче S^{ext} не требуется непрерывная продолжимость первых производных функции $u(x)$ на контур Γ^2 , а требуется лишь существование на Γ^2 равномерного по $x \in \Gamma^2$ предела комбинации из производных $\partial u / \partial \mathbf{n}_x + \beta \partial u / \partial \boldsymbol{\tau}_x$ при стремлении по нормали к Γ^2 из области D^{ext} . О функции $u(x)$, обладающей таким свойством, будем говорить, что она имеет правильную косую производную [1] на Γ^2 . Задача S^{ext} описывает электрический ток в полупроводниковой пленке (пластинке), расположенной в постоянном однородном магнитном поле, когда на одной части ее границы (Γ^1) задается электрический потенциал, а на другой (Γ^2) — нормальная компонента плотности тока [1].

Внешняя задача Дирихле, рассмотренная в работах [2–5], является частным случаем задачи S^{ext} при $N_2 = 0$. Внешняя задача с косой производной ($N_1 = 0$) изучалась в работах [1, 6, 7] и в задаче S^{ext} исключается из рассмотрения.

Исследование единственности решения задачи S^{ext} проведем методом энергетических тождеств.