

О ЗАМКНУТОМ ИНТЕРПОЛЯЦИОННОМ УРАВНЕНИИ СОСТОЯНИЯ ДЛЯ ПРОСТОЙ ЖИДКОСТИ

© 2023 г. В. Б. Бобров*

Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

*E-mail: vic5907@mail.ru

Поступила в редакцию 17.09.2022 г.

После доработки 10.11.2022 г.

Принята к публикации 06.12.2022 г.

На основе точных соотношений квантовой статистической теории для кулоновских систем и приближения Борна—Оппенгеймера получено замкнутое интерполяционное уравнение, связывающее давление и его производную по плотности при фиксированной температуре, для простой квази-классической жидкости, в которой эффективный парный потенциал межчастичного взаимодействия имеет фурье-преобразование.

DOI: 10.31857/S0040364423030043

ВВЕДЕНИЕ

Хотя задача о построении интерполяционного уравнения состояния простой жидкости имеет длительную историю, до настоящего времени эта задача остается актуальной (см. [1–7] и цитируемую там литературу). В подавляющем большинстве случаев теоретической основой для решения подобной задачи являются результаты применения к описанию термодинамических свойств простой жидкости интегральных уравнений для корреляционных функций, а также теории возмущений по отношению к некоторой “основной системе” (“reference system”), для которой имеются аналитические выражения как для термодинамических, так и для корреляционных функций (см. подробнее [8]). Наиболее часто в качестве основной системы используется жидкость твердых сфер либо приближение идеального газа. В последнем случае существенное значение имеет фурье-преобразование для потенциала межчастичного взаимодействия, при наличии которого интегральные соотношения (уравнения) могут быть “свернуты” в алгебраические, что позволяет упростить рассмотрение задачи.

Однако при описании простой жидкости наибольшее распространение получили модельные потенциалы межчастичного взаимодействия, для которых не существует фурье-преобразования вследствие расходимости соответствующего интеграла на малых расстояниях между частицами простой жидкости, в частности потенциал Леннарда—Джонса (см., например, [9]).

Более того, возникает иллюзия, что фактически единственный потенциал, имеющий фурье-преобразование, описывает кулоновское взаимодействие заряженных частиц. Другими словами, создается впечатление, что постановка вопроса об использовании фурье-преобразования имеет смысл только при рассмотрении кулоновских систем (КС), частным случаем которых являются плазменные системы. Здесь и далее под КС понимается квантовая нерелятивистская модель вещества, в которой заряженные частицы различных сортов взаимодействуют между собой по закону Кулона. Эта модель наиболее адекватно описывает реальное вещество в широком диапазоне термодинамических параметров [10, 11]. Между тем, при теоретическом исследовании равновесных свойств КС до настоящего момента используются два различных подхода: химическая и физическая модели, отличающиеся выбором “исходных частиц” для статистического описания. В качестве исходных частиц в химической модели могут выступать “свободные” электроны, атомы, ионы, молекулы, в то время как в физической модели в нерелятивистском приближении в качестве исходных частиц выступают электроны и ядра (см., например, [10]).

При этом в физической модели атомы, ионы, молекулы рассматриваются как связанные состояния электронов и ядер, которые образуются в результате их сильного взаимодействия. Если такие связанные состояния преобладают, в рамках химической модели из физических соображений вещество рассматривается как система взаимо-

действующих атомов или молекул (нейтральные газ или жидкость) при условии, что энергия их взаимодействия мала по сравнению с энергией связи составных частиц [10]. С ростом температуры возникает необходимость учета несвязанных состояний электронов (“свободные” электроны) и ионов, что означает переход нейтрального газа в плазменное состояние.

Таким образом, *a priori* полагается, что при определенных термодинамических параметрах атомы, ионы, молекулы, являющиеся исходными частицами в химической модели, могут служить подходящей основой для описания свойств вещества, как, например, для нейтральных газов (простых жидкостей) или низкотемпературной газовой плазмы. Однако при других условиях, которые характеризуются высокой температурой или большой плотностью вещества, такие исходные частицы практически не играют роли, например в газовой высокотемпературной полностью ионизованной плазме или в сильно сжатом плотном веществе [11]. В результате пределы применимости химической модели вещества могут быть определены только на основе физической модели, в рамках которой вещество рассматривается как КС.

В этой ситуации как сама концепция, так и выбор модельных потенциалов, описывающих взаимодействие исходных частиц в простой жидкости, включая особенности поведения этих потенциалов в зависимости от расстояния между частицами, нуждаются в обсуждении. При этом необходимо учитывать, что фактически единственным малым параметром в статистической термодинамике КС является отношение масс электрона m_e и ядра m_c ($m_e/m_c \ll 1$), что позволяет применить приближение Борна–Оппенгеймера (адиабатическое приближение) для описания подсистемы ядер. Более того, само представление об атомах и молекулах как об исходных частицах возможно только в приближении Борна–Оппенгеймера (см., например, [12, 13]).

Как показано в [14], равновесные свойства КС, состоящей из электронов и тождественных ядер одного сорта в адиабатическом приближении для подсистемы ядер, определяются термодинамическими характеристиками однородной электронной жидкости в компенсирующем положительном фоне и подсистемы ядер, взаимодействующих между собой посредством эффективного потенциала. В свою очередь этот потенциал, помимо кулоновского взаимодействия ядер между собой, определяется равновесной неоднородной плотностью электронов, находящихся в кулоновском поле тождественных ядер. Однако такой эффективный потенциал зависит от пространственных переменных всех ядер КС. По этой причине ввести в рассмотрение эффективный парный потенциал взаимодействия ядер можно только в

двух предельных случаях: для разреженного газа исходных атомов [15, 16] (см. также [17]) и в случае сильно сжатого вещества, когда влиянием связанных электронных состояний можно пренебречь (см., например, [18]). При этом в обоих случаях соответствующий парный потенциал взаимодействия имеет фурье-преобразование с учетом особенностей такого преобразования для кулоновского потенциала взаимодействия [15, 16, 18]. Тем не менее даже в указанных случаях получение явных аналитических выражений для эффективного парного потенциала взаимодействия ядер не представляется возможным — речь может идти только о численных расчетах. Таким образом, согласно сказанному выше, далее будем считать, что используемые в теории простой жидкости модельные потенциалы межчастичного взаимодействия известны, имеют фурье-преобразование, а их параметры являются подгоночными с точки зрения сравнения теоретических результатов с имеющимися экспериментальными данными.

Необходимо отметить, что, начиная с работы [19] и до настоящего времени (см. подробнее [20–25]), построение интерполяционного уравнения состояния простой жидкости с использованием модельных потенциалов, имеющих фурье-преобразование, реализуется в рамках классической статистической теории на основе канонического распределения Гиббса. Между тем, как известно (см., например, [26]), энтропия и химический потенциал, будучи немеханическими величинами, не имеют классического ($\hbar \rightarrow 0$) предела. Здесь и далее $\hbar$ — постоянная Планка. Это означает, что последовательное рассмотрение термодинамических свойств простой жидкости необходимо проводить в рамках квантовой статистической теории с последующим использованием квазиклассического приближения (см. [27, 28] и цитируемую там литературу).

Более того, как будет показано в настоящей работе, используемое в [20–25] для построения интерполяционного уравнения состояния простой жидкости выражение для свободной энергии имеет область применимости, ограниченную двумя указанными выше предельными случаями при введении в рассмотрение модельного парного потенциала межчастичного взаимодействия. Речь идет о слабонеидеальном разреженном квазиклассическом газе и слабонеидеальном вырожденном квантовом газе.

Для выхода за рамки приближения слабонеидеального газа при построении интерполяционного уравнения состояния простой жидкости в настоящей работе используется ряд точных соотношений квантовой статистической теории. Это предполагает первоначальное рассмотрение не свободной энергии, а термодинамического потенциала Гиббса (так называемого Ω -потенциа-

ла) с применением большого канонического распределения Гиббса и соответствующих результатов диаграммной техники теории возмущений (см., например, [29]). На этой основе в соответствующем приближении будет получено замкнутое интерполяционное уравнение для давления и его производной по плотности при фиксированной температуре с учетом особенностей фурье-преобразования для парного модельного потенциала межчастичного взаимодействия.

ИНТЕРПОЛЯЦИОННОЕ ВЫРАЖЕНИЕ ДЛЯ СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ ПРОСТОЙ КВАЗИКЛАССИЧЕСКОЙ ЖИДКОСТИ

Основой для решения задачи о вычислении свободной энергии $F(T, V, N)$ квантовой системы, находящейся в объеме V при температуре T (в энергетических единицах) и состоящей из N частиц с гамильтонианом $\hat{H}(\lambda)$, который зависит от некоторого безразмерного параметра λ , является известное соотношение [30]

$$(\partial F / \partial \lambda)_{T, V, N} = \langle \partial \hat{H}(\lambda) / \partial \lambda \rangle_{C, \lambda}, \quad (1)$$

где угловые скобки с индексами C, λ обозначают осреднение с каноническим распределением Гиббса (индекс C), которое определяется гамильтонианом $\hat{H}(\lambda)$. С учетом сказанного выше запишем оператор $\hat{H}_{SL}(\lambda)$ для простой жидкости в виде

$$\hat{H}_{SL}(\lambda) = \hat{H}_0 + \lambda \hat{W}_{SL}, \quad \hat{H}_0 = \sum_{p\sigma} \varepsilon_0(p) \hat{a}_{p\sigma}^+ \hat{a}_{p\sigma}. \quad (2)$$

Здесь и далее $\hat{H}_0$ — оператор кинетической энергии для частиц простой жидкости с массой m и спином s , $\varepsilon_0(p) = \hbar^2 p^2 / 2m$ — энергия свободной частицы, $\hat{a}_{p\sigma}^+$ и $\hat{a}_{p\sigma}$ — соответственно операторы рождения и уничтожения частиц простой жидкости с импульсом $\hbar \mathbf{p}$ и проекцией спина σ , $\hat{W}_{SL}$ — гамильтониан взаимодействия частиц простой жидкости

$$\hat{W}_{SL} = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\{p\sigma\}} v_{SL}(\mathbf{q}) \times \\ \times \hat{a}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}/2, \sigma_1}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}-\mathbf{q}/2, \sigma_2}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}/2, \sigma_2} \hat{a}_{\mathbf{p}-\mathbf{q}/2, \sigma_1}, \quad (3)$$

где $v_{SL}(\mathbf{q})$ — фурье-преобразование для парного модельного потенциала взаимодействия частиц простой жидкости $w_{SL}(r)$

$$w_{SL}(r) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} v_{SL}(\mathbf{q}) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}), \\ v_{SL}(\mathbf{q}) = \int_V d^3r w_{SL}(r) \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}). \quad (4)$$

Очевидно, что при $\lambda = 1$ оператор $\hat{H}_{SL}(\lambda)$ (2) соответствует точному гамильтониану простой жид-

кости. Особенности фурье-преобразования для кулоновского потенциала взаимодействия рассмотрены в [31].

Таким образом, с учетом (1)–(4) для свободной энергии простой жидкости

$$F_{SL}(N, V, T) = -T \ln \text{Tr} \exp(-\hat{H}_{LM}(\lambda = 1)/T) \quad (5)$$

справедливо равенство

$$F_{SL}(N, V, T) = F_0(N, V, T) + \Delta F_{SL}(N, V, T), \quad (6)$$

где $F_0(N, V, T) = -T \ln \text{Tr} \exp(-\hat{H}_0/T)$ — свободная энергия идеального газа частиц, Tr обозначает процедуру взятия следа соответствующего оператора,

$$\Delta F_{SL}(N, V, T) = \frac{1}{2} v_{SL}(0) \bar{n} N + \\ + \frac{1}{2} \bar{n} \int_0^1 d\lambda \sum_{\mathbf{q} \neq 0} v_{SL}(\mathbf{q}) \{S_{SL}^{(C, \lambda)}(\mathbf{q}) - 1\}, \quad (7) \\ S_{SL}^{(C, \lambda)}(\mathbf{q}) = N^{-1} \langle \delta \hat{\rho}(\mathbf{q}) \delta \hat{\rho}(-\mathbf{q}) \rangle_{C, \lambda},$$

$S_{SL}^{(C, \lambda)}(\mathbf{q})$ — так называемый статический структурный фактор простой жидкости, который непосредственно связан с соответствующей парной корреляционной функцией и может быть измерен в экспериментах по упругому рассеянию нейтронов [8], а также электронов (в том числе с помощью синхротронного излучения) и рентгеновских лучей,

$$\delta \hat{\rho}(\mathbf{q}) = \hat{\rho}(\mathbf{q}) - N \delta_{\mathbf{q}, 0}, \quad \hat{\rho}(\mathbf{q}) = \sum_{\{p\sigma\}} \hat{a}_{\mathbf{p}-\mathbf{q}/2, \sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}/2, \sigma},$$

$\bar{n} = N/V$ — средняя плотность числа частиц простой жидкости.

После перехода в (5), (6) к термодинамическому пределу $\lim_T: N \rightarrow \infty, V \rightarrow \infty, \bar{n} = \text{const}$ величина $S_{SL}^{(C, \lambda)}(\mathbf{q})$ для однородной и изотропной жидкости является функцией от модуля волнового вектора $q \equiv |\mathbf{q}|$, поэтому для удельной свободной энергии, приходящейся на единицу объема простой жидкости, которая и имеет физический смысл, находим

$$\Delta \bar{f}_{SL}(\bar{n}, T) \equiv \lim_T \frac{\Delta F_{SL}(N, V, T)}{V} = \frac{1}{2} v_{SL}(0) \bar{n}^2 + \\ + \frac{1}{2} \bar{n} \int_0^1 d\lambda \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} v_{SL}(q) \{S_{SL}^{(C, \lambda)}(q) - 1\}. \quad (8)$$

Обратим внимание, что уже на этапе непосредственного определения свободной энергии $F_0(N, V, T)$ для идеального газа на основе квантового канонического распределения возникает вычислительная проблема. Дело в том, что использование числа частиц N в рассматриваемой системе как независимой переменной для сво-

бодной энергии является ограничивающим условием на собственные значения оператора полного числа частиц $\hat{N} = \sum_{\{\rho\sigma\}} \hat{a}_{\rho\sigma}^+ \hat{a}_{\rho\sigma}$. Это обстоятельство приводит, как известно (см., например, [32]), к невозможности непосредственного вычисления свободной энергии квантового идеального газа при использовании канонического распределения. В результате определение величины $F_0(N, V, T)$ осуществляется с применением большого канонического распределения посредством вычисления термодинамического потенциала Гиббса для идеального квантового газа $\Omega_0(T, V, \mu) = -T \ln \text{Tr} \exp(-(\hat{H}_0 - \mu \hat{N})/T)$, где μ – химический потенциал для рассматриваемой системы как независимая переменная (см. подробнее [30, 32]), в частности:

$$\begin{aligned} \bar{\omega}_0(T, \mu) &= \lim_T \frac{\Omega_0(T, V, \mu)}{V} = -P_0(T, \mu) = \\ &= \frac{2}{3}(2s+1) \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \varepsilon_0(p) f_0(p; T, \mu), \\ \bar{n}_0(T, \mu) &= \lim_T \frac{\langle \hat{N} \rangle_{QC,0}(T, V, \mu)}{V} = \\ &= (2s+1) \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} f_0(p; T, \mu), \end{aligned} \quad (9)$$

где $P_0(T, \mu)$, $\bar{n}_0(T, \mu)$ и $f_0(p; T, \mu)$ – соответственно давление, средняя плотность числа частиц и функция распределения по импульсам (Ферми–Дирака или Бозе–Эйнштейна) в идеальном газе как функции независимых переменных T и μ , угловые скобки с индексом QC обозначают осреднение с большим каноническим распределением.

Далее по определению может быть найдена величина $F_0(T, V, \mu) \equiv \Omega_0(T, V, \mu) + \mu \langle \hat{N} \rangle_{QC,0}$. Нетрудно убедиться, что $(\partial \langle \hat{N} \rangle_{QC} / \partial \mu)_{T,V} > 0$ [30, 32]. Это означает, что величина $\bar{n}(T, \mu) \equiv \lim_T \langle \hat{N} \rangle_{QC} / V$ в простой жидкости, как и в случае идеального газа, является однозначной функцией химического потенциала μ .

Полагая, что результаты применения различных распределений приводят к эквивалентным результатам [30, 32], будем считать, что средняя плотность числа частиц $\bar{n}$, заданная в каноническом распределении, равна функции $\bar{n}_0(T, \mu)$ для идеального газа с заменой химического потенциала μ на функцию $\mu_0(T, \bar{n})$. С учетом (9) это означает, что уравнение для определения функции $\mu_0(T, \bar{n})$ имеет вид

$$\bar{n} = (2s+1) \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} f_0(p; T, \mu_0(T, \bar{n})). \quad (10)$$

Аналитическое решение уравнения (10) возможно только в двух предельных случаях: слабого и сильного вырождения (см. подробнее [30, 32]). В частности, в квазиклассическом пределе ($\hbar \rightarrow 0$) для разреженного идеального газа имеем

$$\begin{aligned} P_0(T, \bar{n}) &= \bar{n} T, \\ \mu_0(T, \bar{n}) &= T \ln(\bar{n} \Lambda^3 / (2s+1)) < 0, \end{aligned} \quad (11)$$

где $\Lambda = (2\pi\hbar^2/mT)^{1/2}$ – тепловая длина волны де Бройля. Как сказано выше, химический потенциал идеального газа $\mu_0(T, \bar{n})$, будучи немеханической величиной, не имеет классического предела. Отметим также явную зависимость величины $\mu_0(T, \bar{n})$ от спина частицы s . Другими словами, соответствие между результатами применения классической и квантовой механики при описании макроскопического тела имеет место только в отношении “механических” величин, например давления.

Перейдем далее к рассмотрению эффектов межчастичного взаимодействия в свободной энергии простой жидкости. Согласно (8) основной проблемой является вычисление статического структурного фактора $S_{SL}^{(C,\lambda)}(q)$ (7). Оператор $\hat{\rho}(\mathbf{q})$ в определении величины $S_{SL}^{(C,\lambda)}(q)$ (7) в “координатном” представлении имеет вид $\hat{\rho}(\mathbf{q}) \rightarrow \sum_{j=1}^N \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j)$, где $\mathbf{r}_j$ – пространственная переменная j -й частицы простой жидкости. С этой точки зрения статический структурный фактор можно отнести к “механической” величине, которая имеет классический предел. Учитывая связь статического структурного фактора $S_{SL}^{(C,\lambda)}(q)$ с фурье-преобразованием парной корреляционной функции $g_{SL}^{(\lambda)}(q)$ – $S_{SL}^{(C,\lambda)}(q) = 1 + \bar{n} g_{SL}^{(\lambda)}(q)$, приходим к выводу, что в квазиклассическом пределе величина (8) полностью определяется классическим конфигурационным интегралом $Q_{SL}^{(cl)}(N, V, T)$, который при заданных величинах N, V, T однозначно зависит только от потенциала межчастичного взаимодействия.

При этом для вычисления конфигурационного интеграла $Q_{SL}^{(cl)}(N, V, T)$ имеется соответствующая диаграммная техника теории возмущений (так называемое λ -разложение), допускающая использование фурье-преобразования для потенциала межчастичного взаимодействия и приводящая, в частности, к виральному разложению для термодинамических функций простой классической жидкости (см. [32] и цитируемую там литературу). В свою очередь применение λ -разложения и процедуры частичного суммирования диаграмм определенного типа приводит к возможности полу-

чения различных замкнутых интегральных уравнений для парной корреляционной функции, которые активно используются при исследовании разных свойств простой классической жидкости (см. подробнее [8, 26, 32] и цитируемую там литературу).

Однако эти рассуждения находятся в противоречии с предшествующим выводом о том, что в рамках квантовой статистической теории имеются существенные ограничения в вычислительных возможностях использования канонического распределения Гиббса, обусловленные фиксированием полного числа частиц N простой жидкости в заданном макроскопическом объеме V . Очевидно, эти ограничения не могут быть преодолены переходом к квазиклассическому пределу. При этом необходимо учитывать, что исходным распределением равновесной статистической теории является микроканоническое распределение Гиббса с заданными значениями N, V, E , где E — полная энергия рассматриваемой замкнутой системы, состоящей из N тождественных частиц, заключенных в макроскопическом объеме V [26, 30, 32]. Но значение энергии E существенным образом зависит от граничных условий для волновой функции замкнутой системы на “бесконечности” [33]. Это означает нахождение рассматриваемой системы в весьма экзотическом “самосжатом” состоянии с нулевыми значениями для волновой функции на бесконечности [34], которое, с одной стороны, не имеет термодинамического предела, а с другой, не может быть использовано для описания разреженной системы. С этой точки зрения применяемый в феноменологической термодинамике подход соответствует понятию замкнутой системы как системы с заданными значениями числа тождественных частиц N , макроскопического объема V и суммарной энергии E , которые фиксируются неким потенциальным внешним полем с “бесконечными потенциальными стенками” [30]. В свою очередь рассмотрение малой, но макроскопической подсистемы, находящейся в термодинамическом равновесии с исходной замкнутой системой при температуре T , приводит, как принято считать [26, 30, 32], к каноническому распределению Гиббса. Однако, если объем малой подсистемы может быть определен посредством фиксации значений волновой функции на поверхности, ограничивающей объем этой подсистемы, то задание числа тождественных частиц в малой подсистеме означает, что эта подсистема, согласно сказанному выше, находится во внешнем поле с “бесконечными потенциальными стенками”. Тем самым для описания малой подсистемы, являющейся равновесной частью замкнутой системы, следует использовать не каноническое распределение Гиббса, а большое каноническое распределение Гиббса, в котором фиксируется значение μ , а не величина N [35].

Обратим внимание, что задание значений химического потенциала μ и температуры T означает, что исходная замкнутая система и ее малая макроскопическая часть находятся в термодинамическом равновесии (условия фазового равновесия) [30]. При этом “отказ” от канонического распределения Гиббса не приводит к умалению результатов применения понятия свободной энергии $F(T, V, N)$. Речь идет только о том, что свободную энергию следует вычислять через термодинамический потенциал Гиббса $\Omega(T, V, \mu)$ по аналогии с тем, как это сделано выше в отношении идеального газа.

В этой связи напомним, что традиционный вывод классического вириального разложения основан на использовании большого канонического распределения Гиббса (см. подробнее [32] и цитируемую там литературу). Соответствующая теория квазиклассических неидеальных газов была одной из первых теорий, построенных с систематическим применением диаграммной техники и использованием соответствия между топологическими свойствами диаграмм и аналитическими свойствами соответствующих интегралов. Эта идея позднее была широко распространена в квантовой теории поля и квантовой статистической теории (см. подробнее [10, 11, 29] и цитируемую там литературу). При этом соотношение (1) остается в силе с точностью до замены свободной энергии $F(T, V, N)$ на термодинамический потенциал Гиббса $\Omega(T, V, \mu)$ [10, 11]:

$$(\partial\Omega/\partial\lambda)_{T,V,\mu} = \langle \partial\hat{H}(\lambda)/\partial\lambda \rangle_{GC,\lambda}, \quad (12)$$

где угловые скобки с индексами GC, λ обозначают осреднение с большим каноническим распределением Гиббса (индекс GC), которое определяется гамильтонианом $\hat{H}(\lambda)$ (2)–(4). Более того, выражения (2), (3) для гамильтониана $\hat{H}(\lambda)$ основаны на использовании полного набора плоских волн, удовлетворяющих периодическим граничным условиям на поверхности, ограничивающей объем рассматриваемой системы V , что и соответствует использованию большого канонического распределения Гиббса [32]. Таким образом, соотношение (8) с учетом (12) принимает вид

$$\Omega_{SL}(\mu, V, T) = -P(T, \mu)V = \Omega_0(\mu, V, T) + \Delta\bar{\Omega}_{SL}(\mu, V, T), \quad (13)$$

где $\Omega_0(\mu, V, T) = -T \ln \text{Tr} \exp(-(\hat{H}_0 - \mu\hat{N})/T)$ — термодинамический потенциал Гиббса для идеального газа частиц, $P(T, \mu)$ — давление в рассматриваемой системе,

$$\Delta\bar{\Omega}_{SL}(\mu, V, T) = \frac{1}{2V} v_{SL}(0) \langle \hat{N}^2 \rangle_{GC} + \frac{1}{2V} \hat{N}_{GC} \times \int_0^1 d\lambda \sum_{\mathbf{q} \neq 0} v_{SL}(\mathbf{q}) \{ S_{SL}^{(GC, \lambda)}(\mathbf{q}) - 1 \}, \quad (14)$$

$$\Delta\bar{\omega}_{SL}(\mu, T) \equiv \lim_T \frac{\Delta\bar{\Omega}_{SL}(\mu, V, T)}{V} = \frac{1}{2} v_{SL}(0) \bar{n}^2 + \frac{1}{2} \bar{n} \int_0^1 d\lambda \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} v_{SL}(q) \{ S_{SL}^{(GC, \lambda)}(q) - 1 \}, \quad (15)$$

$\bar{n} = \lim_T \langle \hat{N} \rangle_{GC} / V = \bar{n}(\mu, T)$ — средняя плотность числа частиц в рассматриваемой системе. Учитывая проведенное выше обсуждение, статический структурный фактор $S_{SL}^{(GC, \lambda)}(q)$, фигурирующий в соотношении (14), при использовании большого канонического распределения Гиббса определяется через так называемую функцию отклика $\chi_{SL}^{(GC, \lambda)}(q, \omega)$, описывающую поведение средней неоднородной плотности в слабом внешнем скалярном поле:

$$\begin{aligned} \bar{n} S_{SL}^{(GC, \lambda)}(q) &= -\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{\text{Im} \chi_{SL}^{(GC, \lambda)}(q, \omega)}{1 - \exp(-\hbar\omega/T)}, \\ \chi_{SL}^{(GC, \lambda)}(q, \omega) &= -\frac{i}{\hbar} \lim_T \frac{1}{V} \times \\ &\times \int_0^{\infty} dt \exp(i\omega t) \langle [\delta\hat{\rho}(\mathbf{q}, t), \delta\hat{\rho}(-\mathbf{q}, 0)] \rangle_{GC, \lambda}, \quad (16) \\ \delta\hat{\rho}(\mathbf{q}, t) &= \exp(i\hat{H}_{SL}(\lambda)t/\hbar) \times \\ &\times \delta\hat{\rho}(\mathbf{q}) \exp(-i\hat{H}_{SL}(\lambda)t/\hbar). \end{aligned}$$

Из определения (16) непосредственно следует, что функция отклика $\chi_{SL}^{(GC, \lambda)}(q, z)$ может быть аналитически продолжена в верхнюю полуплоскость комплексных значений частоты $z(\text{Im} z > 0)$. Более того, в точках $\hbar z_n = i\Omega_n$, $\Omega_n = 2\pi n T (n = 0; 1; \dots)$ на мнимой оси совпадает с соответствующей температурной функцией Грина $\chi_{SL}^{(T, \lambda)}(q, i\Omega_n)$ [10, 11, 29]. При этом, используя спектральные представления для функций $\chi_{SL}^{(GC, \lambda)}(q, \omega)$ и $\chi_{SL}^{(T, \lambda)}(q, i\Omega_n)$, можно показать, что [35] (см. также [36]) имеет вид

$$\begin{aligned} \bar{n} S_{SL}^{(GC, \lambda)}(q) &= -T \sum_{\eta=-\infty}^{\infty} \chi_{SL}^{(T, \lambda)}(q, i\Omega_n), \quad (17) \\ \lim_{\hbar \rightarrow 0} \bar{n} S_{SL}^{(GC, \lambda)}(q) &= -T \lim_{\hbar \rightarrow 0} \chi_{SL}^{(T, \lambda)}(q, 0). \end{aligned}$$

Таким образом, вычисление величины $\Delta\bar{\omega}_{SL}(\mu, T)$ (15) сводится к определению статической функции Грина $\chi_{SL}^{(T, \lambda)}(q, 0)$. Для вычисления температурных функций Грина разработана диаграммная техника, основанная на методах кван-

товой теории поля (см. подробнее [10, 11, 29] и цитируемую там литературу). В частности, для функции Грина $\chi_{SL}^{(T, \lambda)}(q, i\Omega_n)$ имеет место соотношение

$$\begin{aligned} \chi_{SL}^{(T, \lambda)}(q, i\Omega_n) &= \Pi_{SL}^{(T, \lambda)}(q, i\Omega_n) + \\ &+ \Pi_{SL}^{(T, \lambda)}(q, i\Omega_n) \lambda v_{SL}(q) \chi_{SL}^{(T, \lambda)}(q, i\Omega_n), \end{aligned} \quad (18)$$

где $\Pi_{SL}^{(T, \lambda)}(q, i\Omega_n)$ — так называемый поляризационный оператор (поляризационная функция), который является частью функции $\chi_{SL}^{(T, \lambda)}(q, i\Omega_n)$, неприводимой в “ q -канале” по одной линии взаимодействия $\lambda v_{SL}(q)$. Хотя проблема учета эффектов межчастичного взаимодействия в различных корреляционных функциях имеет длительную историю, решение этой задачи остается актуальным до настоящего времени (см., например, [37–39] и цитируемую там литературу). По этой причине наиболее распространенным для поляризационного оператора является хорошо известное приближение хаотических фаз (random phase approximation (RPA)):

$$\begin{aligned} \Pi_{SL}^{\text{RPA}}(q, i\Omega_n) &= (2s + 1) \lim_T \frac{1}{V} \times \\ &\times \sum_{\mathbf{p}} \frac{f_0(\mathbf{p} - \mathbf{q}/2; T, \mu) - f_0(\mathbf{p} + \mathbf{q}/2; T, \mu)}{i\Omega_n + \varepsilon_0(\mathbf{p} - \mathbf{q}/2) - \varepsilon_0(\mathbf{p} + \mathbf{q}/2)}. \end{aligned} \quad (19)$$

Фактически в RPA полностью отсутствует учет эффектов межчастичного взаимодействия для поляризационного оператора. Другими словами, $\Pi_{SL}^{\text{RPA}}(q, i\Omega_n)$ является поляризационным оператором для идеального газа. В свою очередь для функции Грина $\chi_{SL}^{(T, \lambda)}(q, i\Omega_n)$, согласно (18), (19), находим

$$\begin{aligned} \chi_{SL}^{\text{RPA}}(q, i\Omega_n) &= \Pi_{SL}^{\text{RPA}}(q, i\Omega_n) \times \\ &\times (1 - \lambda v_{SL}(q) \Pi_{SL}^{\text{RPA}}(q, i\Omega_n))^{-1}. \end{aligned} \quad (20)$$

Соотношение (20) можно считать справедливым при рассмотрении слабонеидеальных газов, которые характеризуются интегральной малостью межчастичного взаимодействия в силу малости параметра неидеальности $\gamma = \bar{n} \bar{v}_{SL} / \bar{\varepsilon}$, где $\bar{v}_{SL}$ и $\bar{\varepsilon}$ — соответственно характерные значения для фурье-преобразования парного потенциала межчастичного взаимодействия и энергии, приходящейся на одну частицу ($\gamma \ll 1$). В частности, при рассмотрении квазиклассической однокомпонентной плазмы условие $\gamma \ll 1$ соответствует приближению Дебая–Хюккеля.

Учитывая (10), (11), (19), (20), нетрудно убедиться, что в квазиклассическом приближении для функций $\Pi_{SL}^{\text{RPA}}(q, 0)$ и $\chi_{SL}^{\text{RPA}}(q, 0)$ имеют место равенства

$$\begin{aligned} T \lim_{h \rightarrow 0} \Pi_{SL}^{\text{RPA}}(q, 0) &= -\bar{n}, \\ T \lim_{h \rightarrow 0} \chi_{SL}^{\text{RPA}}(q, 0) &= -\bar{n}(1 + \lambda v_{SL}(q) \bar{n}/T)^{-1}. \end{aligned} \quad (21)$$

Подставляя (21) в (15)–(17), находим

$$\begin{aligned} \Delta \bar{\omega}_{SL}(\mu, T) &= \frac{1}{2} v_{SL}(0) \bar{n}^2 - \frac{1}{2} \bar{n} T \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} v_{SL}(q) \times \\ &\times \left\{ \ln \left(1 + \frac{v_{SL}(q) \bar{n}}{T} \right) - \frac{v_{SL}(q) \bar{n}}{T} \right\}, \end{aligned} \quad (22)$$

что соответствует известным результатам (см., например, [20, 25]) для поправки, обусловленной учетом межчастичного взаимодействия, к свободной энергии простой жидкости. Однако, как следует из представленного вывода соотношения (22), его справедливость имеет место только для значений параметра неидеальности $\gamma \ll 1$ при условии, что величина средней плотности числа частиц $\bar{n}$ определяется соотношением (10). Это означает, что равенство (22) может быть использовано для описания термодинамических свойств слабонеидеального квазиклассического газа, который характеризуется интегральной малостью межчастичного взаимодействия, и непригодно в отношении конденсированного состояния.

ТЕОРЕМА ВИРИАЛА И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ ГИББСА ДЛЯ ПРОСТОЙ КВАЗИКЛАССИЧЕСКОЙ ЖИДКОСТИ

Для выхода за рамки приближения слабонеидеального газа следует использовать точные соотношения квантовой статистической теории, в частности теорему вириала [32, 40], справедливость которой непосредственно связана с проблемой граничных условий для волновых функций [41, 42]. Особенности применения теоремы вириала для исследования термодинамических характеристик КС рассмотрены в [43, 44] и цитируемой там литературе.

Согласно проведенному выше рассмотрению, используем теорему вириала для простой квантовой жидкости в следующем виде [45]:

$$\begin{aligned} P(T, \mu) &= \frac{2}{3} \lim_T \frac{\langle \hat{H}_0 \rangle_{GC}}{V} + \frac{1}{2} v_{SL}(0) \bar{n}^2 + \\ &+ \frac{1}{6} \bar{n} \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \{ 3v_{SL}(q) + \mathbf{q} \cdot \nabla_{\mathbf{q}} v_{SL}(q) \} \times \\ &\times \{ S_{SL}^{(GC)}(q) - 1 \}, \end{aligned} \quad (23)$$

где $\langle \hat{H}_0 \rangle_{GC}$ — точная средняя кинетическая энергия, определяемая с использованием большого канонического распределения Гиббса:

$$\begin{aligned} \lim_T \frac{\langle \hat{H}_0 \rangle_{GC}}{V} &= (2s+1) \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \epsilon_0(p) f(p; T, \mu), \\ f(p; T, \mu) &= \langle \hat{a}_{\mathbf{p}0}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}0} \rangle_{GC}. \end{aligned} \quad (24)$$

Здесь $f(p; T, \mu)$ — точная функция распределения по импульсам как функция независимых переменных T и μ , для вычисления которой за рамками модели идеального газа следует использовать методы квантовой теории поля [10, 11, 29]. В этом случае, согласно (23), уравнение состояния при самосогласованном определении функций $f(p; T, \mu)$ и $S_{SL}^{(GC)}(q)$ полностью определяется двухчастичной температурной функцией Грина [46, 47]. Это означает, что в настоящее время буквальное применение соотношений (23), (24) возможно только для описания слабонеидеального квантового газа. Однако, если ограничиться рассмотрением квазиклассической простой жидкости, соотношения (24) можно существенно упростить [32, 40]:

$$\begin{aligned} \lim_{h \rightarrow 0} \lim_T \frac{\langle \hat{H}_0 \rangle_{GC}}{V} &= \frac{3}{2} \bar{n}(T, \mu) T, \\ \bar{n}(T, \mu) &= (2s+1) \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} f(p; T, \mu). \end{aligned} \quad (25)$$

При этом в (25) можно считать, что функция $\bar{n}(T, \mu)$ определяет точную среднюю плотность числа частиц в простой жидкости в соответствии с термодинамическим равенством $\bar{n}(T, \mu) = -(\partial P(T, \mu)/\partial \mu)_T$ [32, 40]. В результате, согласно (24), (25), в квазиклассическом пределе проблема установления термодинамических функций для простой жидкости, включая уравнение состояния, сводится к определению статического структурного фактора $S_{SL}^{(GC)}(q)$ при точном учете эффектов межчастичного взаимодействия.

Далее обратим внимание на следующее обстоятельство: с одной стороны, согласно (19), имеет место равенство

$$\lim_{h \rightarrow 0} \Pi_{SL}^{\text{RPA}}(q, 0) = \lim_{q \rightarrow 0} \Pi_{SL}^{\text{RPA}}(q, 0). \quad (26)$$

С другой стороны, как показано в [48], при точном учете межчастичного взаимодействия

$$\begin{aligned} \lim_{q \rightarrow 0} \Pi_{SL}^{(T)}(q, 0) &= - \left(\frac{\partial \bar{n}(T, \mu)}{\partial \mu} \right)_T \times \\ &\times \left(1 - v_{SL}(0) \left(\frac{\partial \bar{n}(T, \mu)}{\partial \mu} \right)_T \right)^{-1}, \\ T \lim_{q \rightarrow 0} \chi_{SL}^{(GC)}(q, 0) &= -\bar{n} \lim_{q \rightarrow 0} S_{SL}^{(GC)}(q), \end{aligned} \quad (27)$$

так что выполняется хорошо известное предельное соотношение для статического структурного фактора [32]:

$$\lim_{q \rightarrow 0} S_{SL}^{(GC)}(q) = \bar{n} T \kappa_T, \quad (28)$$

где $\kappa_T = -V^{-1}(\partial V / \partial P)_T$ — изотермическая сжимаемость. Равенство (28) следует из (27) в силу справедливости термодинамического соотношения [32]

$$\bar{n}^2 \kappa_T = (\partial \bar{n}(T, \mu) / \partial \mu)_T. \quad (29)$$

Решающее предположение для построения интерполяционного уравнения состояния для квазиклассической простой жидкости заключается в следующем. При выводе равенства (22), которое справедливо для слабонеидеального газа, использовано соотношение (21), которое, согласно (26), эквивалентно утверждению о том, что для характерных значений волновых векторов q функция $\Pi_{SL}^{RPA}(q, 0)$ мало изменяется в рассматриваемой области термодинамических параметров: $\Pi_{SL}^{RPA}(q, 0) \approx \Pi_{SL}^{RPA}(q \rightarrow 0, 0)$. С учетом (24)–(29) при аналогичном предположении в отношении точного статического поляризационного оператора $\Pi_{SL}^{(T)}(q, 0)$ приходим к замкнутому интегродифференциальному интерполяционному уравнению состояния для простой квазиклассической жидкости при фиксированном значении температуры T

$$P_{\text{int}}(T, \bar{n}) = \bar{n} T + \frac{1}{2} v_{SL}(0) \bar{n}^2 + \frac{1}{6} \bar{n} \times \\ \times \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \{3v_{SL}(q) + \mathbf{q} \cdot \nabla_{\mathbf{q}} v_{SL}(q)\} \{S_{SL}^{(0)}(q) - 1\}, \quad (30)$$

$$S_{SL}^{(0)}(q) = -\frac{T}{\bar{n}} \frac{\Pi_{SL}^{(T)}(q \rightarrow 0, 0)}{1 - v_{SL}(q) \Pi_{SL}^{(T)}(q \rightarrow 0, 0)},$$

$$\Pi_{SL}^{(T)}(q \rightarrow 0, 0) = -(\alpha_T - v_{SL}(0))^{-1},$$

где $\alpha_T = \bar{n}^{-1}(\partial P_{\text{int}}(T, \bar{n}) / \partial \bar{n})_T$. Сходимость интеграла по волновым векторам в первом равенстве (30) обеспечивается условием “быстрого” убывания модельного парного потенциала $v_{SL}(q)$ с увеличением волнового вектора q : $\lim_{q \rightarrow \infty} v_{SL}(q) = 0$ (см. (4)).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенный в настоящей работе анализ показывает, что на основе кулоновской модели вещества, представляющей собой совокупность взаимодействующих по закону Кулона электронов и ядер одного сорта, в рамках адиабатического приближения для подсистемы ядер простую жидкость можно рассматривать как систему ядер, которые взаимодействуют между собой посредством эффективного потенциала взаимодействия. Хотя этот эффективный потенциал не является парным, с точки зрения построения интерполяционного уравнения состояния простую жидкость сле-

дует рассматривать как модель исходных атомов, взаимодействующих между собой посредством модельного парного потенциала, имеющего фурье-преобразование. При этом показано, что полученные ранее результаты для интерполяционного уравнения состояния простой квазиклассической жидкости, которая характеризуется наличием фурье-преобразования для парного межчастичного потенциала взаимодействия, могут быть применены только для описания слабонеидеального газа.

Для выхода за рамки приближения слабонеидеального газа в настоящей работе использованы точные соотношения для термодинамических и корреляционных функций с использованием термодинамического потенциала Гиббса и на этой основе получено замкнутое интегродифференциальное уравнение для давления в простой квазиклассической жидкости.

Настоящая работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение с ОИВТ РАН № 075-15-2020-785 от 23 сентября 2020 г.).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Беляев А.М., Воробьев В.С., Хомкин А.Л. Широкодиапазонное уравнение состояния воды // ТВТ. 1990. Т. 28. № 3. С. 348.
2. Воробьев В.С. Исследование равновесия жидкость–пар с помощью интерполяционного уравнения состояния // ТВТ. 1995. Т. 33. № 4. С. 557.
3. Воробьев В.С. Расчет дебаевских температур и коэффициентов Грюнайзена для инертных газов в области разрежения // ТВТ. 1996. Т. 34. № 2. С. 203.
4. Apfelbaum E.M., Vorob'ev V.S. Systematization of the Parameters of Substances due to Their Connection with Heat of Evaporation and Boyle Temperature // Int. J. Thermophys. 2020. V. 41. № 1. P. 8.
5. Apfelbaum E.M., Vorob'ev V.S. The Line of the Unit Compressibility Factor (Zero-Line) for Crystal States // J. Phys. Chem. B. 2020. V. 124. № 24. P. 5021.
6. Apfelbaum E.M., Vorob'ev V.S. Modified Virial Expansion and the Equation of State // Rus. J. Math. Phys. 2021. V. 28. № 2. P. 147.
7. Анфельбаум Е.М., Воробьев В.С. Универсальное уравнение состояния для критической и сверхкритических областей // ТВТ. 2021. Т. 59. № 6. С. 852.
8. Physics of Simple Liquids / Eds. Temperley H.N.V., Rowlinson J.S., Rushbrooke G.S. Amsterdam: North-Holland Publ. Company, 1968 (Физика простых жидкостей. Статистическая теория. Пер. с англ. / Под ред. Темперли Г., Роулинсона Дж., Рашбрука Дж. М.: Мир, 1971. 308 с.).
9. Воробьев В.С. К термодинамике леннард-джонсовских систем // ТВТ. 2004. Т. 42. № 3. С. 383.
10. Ebeling W., Kraeft W.D., Kremp D. Theory of Bound States and Ionization Equilibrium in Plasmas and Solids. Berlin: Akademie-Verlag, 1976. (Эбелинг В., Крефт В., Кремп Д. Теория связанных состояний и ионизационного равновесия в плазме и твердом теле. Пер. с англ. М.: Мир, 1979. 264 с.).

11. *Kraeft W.D., Kremp D., Ebeling W., Ropke G.* Quantum Statistics of Charged Particle Systems. Berlin: Akademie-Verlag, 1986 (*Крефт В., Кремп Д., Эбелинг В., Репке Г.* Квантовая статистика систем заряженных частиц. Пер. с англ. М.: Мир, 1988. 408 с.).
12. *Воробьев В.С., Юнгман В.С.* К расчету термодинамических функций газа многоэлектронных атомов // ТВТ. 1979. Т. 17. № 5. С. 897.
13. *Parr R.G., Yang W.* Density-functional Theory of Atoms and Molecules. N.Y.: Oxford University Press, 1989. 333 p.
14. *Бобров В.Б.* Статистическая термодинамика кулоновской системы и адиабатическое приближение // ТВТ. 2022. Т. 60. № 4. С. 496.
15. *Bobrov V.B., Trigger S.A., van Heijst G.J.F., Sokolov I.M.* Effective Pair Potential for Atoms in the Coulomb Model of a Substance // EPL. 2013. V. 101. № 3. P. 35002.
16. *Бобров В.Б.* О статистической теории разреженного газа в кулоновской модели вещества. Тожественность частиц и эффективный потенциал взаимодействия исходных атомов // ТВТ. 2017. Т. 55. № 2. С. 179.
17. *Воробьев В.С., Хомкин А.Л.* Приближение ближайшего соседа в термодинамике кулоновских систем и плазмы // ТМФ. 1976. Т. 26. № 3. С. 364.
18. *Бобров В.Б.* О свободной энергии жидкометаллической плазмы // ТВТ. 2016. Т. 54. № 3. С. 475.
19. *Зубарев Д.Н.* Вычисление конфигурационных интегралов для системы частиц с кулоновским взаимодействием // ДАН СССР. 1954. Т. 35. № 4. С. 757.
20. *Захаров А.Ю., Локтионов И.К.* Классическая статистика однокомпонентных систем с модельными потенциалами // ТМФ. 1999. Т. 119. № 1. С. 167.
21. *Guerin H.* Analytical Equation of State for Double Yukawa and Hard Core Double Yukawa Fluids: Application to Simple and Colloidal Fluids // Physica A. 2002. V. 304. № 3–4. P. 327.
22. *Lin Y.-Z., Li Y.-G., Lu J.-F.* Study on Analytical Solutions and Their Simplification for One-component Multi-Yukawa Fluids, and Test by Monte Carlo Simulation // Mol. Phys. 2004. V. 102. № 1. P. 63.
23. *Bahaa Khedr M., Osman S.M., Al Busaidi M.S.* New Equation of State for Double Yukawa Potential with Application to Lennard-Jones Fluids // Phys. Chem. Liquids. 2009. V. 47. № 3. P. 237.
24. *Локтионов И.К.* Математическое моделирование термодинамических свойств жидкости на основе двойного потенциала Юкавы. Аналитические результаты // ТВТ. 2019. Т. 57. № 5. С. 677.
25. *Локтионов И.К.* Уравнение состояния жидкости с двойным экспоненциальным потенциалом // ТВТ. 2021. Т. 59. № 2. С. 169.
26. *Huang K.* Statistical Mechanics. N.Y.–London: Wiley, 1963 (*Хуанг К.* Статистическая механика. Пер. с англ. М.: Мир, 1966. 520 с.).
27. *Норман Г.Э., Старостин А.Н.* Несостоятельность классического описания невырожденной плотной плазмы // ТВТ. 1968. Т. 6. № 3. С. 410.
28. *Бобров В.Б., Менделеев В.Я., Тригер С.А.* Точное соотношение для химического потенциала квазиклассической системы // ТВТ. 2015. Т. 53. № 4. С. 634.
29. *Абрикосов А.А., Горьков Л.П., Дзялошинский И.Е.* Методы квантовой теории поля в статистической физике. М.: ГИФМЛ, 1962. 444 с.
30. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Статистическая физика. Ч. 1. М.: Наука, 1976. 584 с.
31. *Бобров В.Б., Загородний А.Г., Тригер С.А.* Об особенностях фурье-преобразования для кулоновского потенциала в статистической теории // Краткие сообщения по физике ФИАН. 2015. № 11. С. 33.
32. *Balescu R.* Equilibrium and Nonequilibrium Statistical Mechanics. N.Y.: Wiley, 1975 (*Балеску Р.* Равновесная и неравновесная статистическая механика. Т. 1. Пер. с англ. М.: Мир, 1978. 405 с.).
33. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: Наука, 1974. 752 с.
34. *Bobrov V.B., Trigger S.A.* The True Dielectric and Ideal Conductor in the Theory of the Dielectric Function of the Coulomb System // J. Phys. A: Math. Theor. 2010. V. 43. № 36. P. 365002.
35. *Бобров В.Б., Тригер С.А., Петров О.Ф.* О соотношении между микроканоническим и каноническим распределениями Гиббса // ТВТ. 2017. Т. 55. № 1. С. 154.
36. *Bobrov V.B.* The Relation between the Static Structure Factor and the “Density-Density” Response Function in the Longwavelength Limit // J. Phys.: Cond. Matt. 1990. V. 2. № 13. P. 3115.
37. *Бобров В.Б., Ключников Н.И., Тригер С.А.* Точные соотношения для структурного фактора кулоновской системы // ТМФ. 1991. Т. 89. № 2. С. 263.
38. *Ichimaru S.* Strongly Coupled Plasmas: High-Density Classical Plasmas and Degenerate Electron Liquids // Rev. Mod. Phys. 1982. V. 54. № 4. P. 1017.
39. *Dornheim T., Groth S., Bonitz M.* The Uniform Electron Gas at Warm Dense Matter Conditions // Phys. Rep. 2018. V. 744. P. 1.
40. *Зубарев Д.Н.* Неравновесная статистическая термодинамика. М.: Наука, 1971. 411 с.
41. *Bobrov V.B., Trigger S.A., Zagorodny A.* Virial Theorem, One-Particle Density Matrix, and Equilibrium Condition in an External Field // Phys. Rev. A. 2010. V. 82. № 4. P. 044105.
42. *Bobrov V.B., Trigger S.A., van Heijst G.J.F., Schram P.P.J.M.* Virial Theorem for an Inhomogeneous Medium, Boundary Conditions for the Wave Functions, and Stress Tensor in Quantum Statistics // Phys. Rev. E. 2010. V. 82. № 1. P. 010102 (R).
43. *Bobrov V.B., Trigger S.A.* Virial Theorem and Gibbs Thermodynamic Potential for Coulomb Systems // Phys. Plasmas. 2014. V. 21. № 10. P. 100703.
44. *Бобров В.Б.* Об условиях самосогласования в статистической термодинамике кулоновской системы // ТВТ. 2020. Т. 58. № 5. С. 758.
45. *Bobrov V., Trigger S., Litinski D.* Universality of Phonon-Roton Spectrum in Liquids and Superfluidity of ^4He // Z. Naturforsch. A (ZNA). 2016. V. 71. № 6. P. 565.
46. *Бобров В.Б.* Термодинамика квантового газа и двухчастичная функция Грина // Письма в ЖЭТФ. 2017. Т. 106. № 6. С. 365.
47. *Бобров В.Б.* О статистической термодинамике квантовых газов // Физика низких температур. 2019. Т. 45. № 1. С. 151.
48. *Bobrov V.B., Klyuchnikov N.I., Trigger S.A.* Explicit Expressions for the Correlation Functions of the Coulomb and Neutral Systems in Longwavelength Limit // Physica A. 1992. V. 181. № 1–2. P. 156.