УДК 530.1

В. В. Огнивенко

Динамический вывод коэффициента диффузии по импульсам кулоновски взаимодействующих заряженных частиц

(Представлено академиком НАН Украины С. В. Пелетминским)

Получены выражения для коэффициентов диффузии частиц в пространстве импульсов на основе динамики движения частиц. Общие формулы используются для определения среднеквадратичного разброса по импульсам нерелятивистских заряженных частиц, взаимодействующих по закону Кулона, на временах, меньших времени хаотизации движения частиц, и бóльших, когда движение является полностью случайным.

Как известно, коэффициент диффузии в пространстве импульсов нерелятивистских заряженных частиц, взаимодействующих по закону Кулона, следует из интеграла столкновений, в котором малые отклонения импульса находились за бесконечно большое время парного взаимодействия частиц [1]. Кинетическое уравнение с таким интегралом столкновений описывает диффузию частиц в импульсном пространстве на кинетическом этапе эволюции системы, т. е. при временах, бóльших некоторого характерного времени хаотизации движения заряженных частиц. Ниже изложен метод, позволяющий на основе динамики движения заряженных частиц описать диффузию частиц в пространстве импульсов не только на кинетической стадии, но также на начальном этапе эволюции системы, на временах, меньших времени хаотизации частиц. Указанный подход использован для нахождения коэффициента диффузии в пространстве импульсов нерелятивистских заряженных частиц, взаимодействующих по закону Кулона.

Рассмотрим систему, состоящую из N тождественных частиц, занимающих объем V и подчиняющихся законам классической динамики. Уравнения движения отдельной (пробной) частицы представим в виде

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = F[\mathbf{r}(t)] = \sum_{s=1}^{N} \mathbf{F}^{(s)}[\mathbf{r}(t), t; x_s], \tag{1}$$

где $\mathbf{p}$ и $\mathbf{r}$ — импульс и координата частицы; $F(\mathbf{r}, t)$ — микроскопическая сила, действующая на частицу в координате $\mathbf{r}$ в момент времени t; $\mathbf{F}^{(s)}(\mathbf{r}, t; x_s)$ — сила парного взаимодействия двух частиц со стороны одной из них (s-й), $x_s(t) \equiv \{\mathbf{r}_s(t), \mathbf{p}_s(t)\}$ — совокупность координат и импульс s-й частицы. В правой части уравнения (1) суммирование проводится по всем частицам системы.

Определяя отклонение от среднего значения импульса частиц

$$\Delta\mathbf{p} = \mathbf{p} - \langle\mathbf{p}\rangle = \int\limits_{t_0}^{t} \delta F[\mathbf{r}(t'), t']\, dt',$$

уравнение для коэффициента диффузии в пространстве импульсов представим в следующем виде:

$$D_{ij} = \frac{d}{2dt}\langle \Delta p_i \Delta p_j \rangle = \frac{1}{2}\int\limits_{t_0}^{t} \langle \delta F_i[\mathbf{r}(t), t] \cdot \delta F_j[\mathbf{r}(t'), t'] + \delta F_j[\mathbf{r}(t), t] \cdot \delta F_i[\mathbf{r}(t'), t'] \rangle \, dt', \tag{2}$$

где $\delta \mathbf{F} = F - \langle \mathbf{F} \rangle$, угловые скобки означают усреднение по ансамблю.

Для вычисления пространственно-временной корреляционной функции флуктуаций силы введем функцию распределения динамических состояний рассматриваемой системы $D_N(x_1(t_0), \ldots, x_N(t_0); t_0)$ в $6N$-мерном фазовом пространстве координат и импульсов частиц в начальный момент времени t_0 [2], нормированную на единицу:

$$\int\limits_{\Omega_x} D_N(x_1(t_0), \ldots, x_N(t_0); t_0) \, dx_1(t_0) \cdots dx_N(t_0) = 1. \tag{3}$$

Областью интегрирования в правой части этого уравнения являются все возможные значения координат и импульсов в начальный момент времени t_0.

С помощью функции D_N среднее значение силы и произведения микроскопических сил в разных точках фазового пространства в разные моменты времени можно представить в виде

$$\langle F(x, t) \rangle = \int\limits_{\Omega_x} \left\{ \sum_{s=1}^{N} \mathbf{F}^{(s)}[x, t; x_s(t, x_{0s})] \right\} D_N(x_{01}, \ldots, x_{0N}; t_0) \, dx_{01} \cdots dx_{0N}, \tag{4}$$

$$\langle F_i(x, t) F_j(x', t') \rangle = \int\limits_{\Omega_x} \left\{ \sum_{p=1}^{N} \sum_{s=1}^{N} F_i^{(p)}[x, t; x_p(t, x_{0p})] F_j^{(s)}[x', t'; x_s(t', x_{0s})] \right\} \times$$

$$\times D_N(x_{01}, \ldots, x_{0N}; t_0) \, dx_{01} \cdots dx_{0N}, \tag{5}$$

где $x_{0i} = x_i(t_0)$.

С учетом симметричности функции D_N относительно перестановки координат частиц в фазовом пространстве выражения (4) и (5) принимают вид:

$$\langle F(x, t) \rangle = \int \mathbf{F}^{(1)}[x, t; x_1(t, x_{01})] f_1(x_{01}, t_0) \, dx_{01}, \tag{6}$$

$$\langle F_i(x, t) F_j(x', t') \rangle = \int F_i^{(1)}[x, t; x_1(t, x_{01})] F_j^{(1)}[x', t'; x_1(t', x_{01})] f_1(x_{01}; t_0) \, dx_{01} +$$

$$+ \left(1 - \frac{1}{N}\right) \int F_i^{(1)}[x, t; x_1(t, x_{01})] F_j^{(2)}[x', t'; x_2(t', x_{02})] f_2(x_{01}, x_{02}; t_0) \, dx_{01} dx_{02}, \tag{7}$$

где $f_1(x, t)$ и $f_2(x, x', t)$ — одночастичная и двухчастичная функции распределения, определяемые соотношениями

$$f_1(x, t_0) = N \int D_N(x, x_{02}, \ldots, x_{0N}; t_0) \, dx_{02} \cdots dx_{0N},$$

$$f_2(x,x',t_0) = N^2 \int D_N(x,x',x_{03},\ldots,x_{0N};t_0)\,dx_{03}\cdots dx_{0N}.$$

Воспользовавшись условием ослабления корреляций при $t_0 \to -\infty$, двухчастичную функцию распределения представим в виде $f_2(x_0,x_0',t_0) = f_1(x_0,t_0)f_1(x_0',t_0)$. Учитывая определение (6) и опуская индекс 1 у координаты x_{01}, запишем уравнение (7) в виде

$$\langle F_i(x,t)F_j(x',t')\rangle = \int F_i^{(1)}[x,t;x_1(t,x_0)]F_j^{(1)}[x',t';x_1(t',x_0)]f_1(x_0;t_0)\,dx_0 + \\ + \left(1-\frac{1}{N}\right)\langle F_i^{(1)}(x,t)\rangle\langle F_j^{(1)}(x',t')\rangle. \qquad (8)$$

Используя далее тождество $\langle \delta F_i(\mathbf{r},t)\delta F_j(\mathbf{r}',t') \equiv \langle F_i(\mathbf{r},t)F_j(\mathbf{r}',t')\rangle - \langle F_i(\mathbf{r},t)\rangle\langle F_j(\mathbf{r}',t')\rangle$ и пренебрегая в правой части выражения (8) членом $1/N$, получим

$$\langle \delta F_i(\mathbf{r},t)\delta F_j(\mathbf{r}',t') = \int F_i^{(1)}[x,t;x_1(t,x_0)]F_j^{(1)}[x',t';x_1(t',x_0)]f_1(x_0;t_0)\,dx_0. \qquad (9)$$

Используя формулу (9), уравнение (2) можно теперь представить в виде

$$D_{ij} = \frac{d}{2dt}\langle \Delta p_i \Delta p_j\rangle = \frac{1}{2}\int\limits_{t_0}^{t}[K_{ij}(t,t') + K_{ji}(t,t')]\,dt', \qquad (10)$$

где $K_{ij} = \int F_i^{(1)}[x,t;x_1(t,x_0)]F_j^{(1)}[x',t';x_1(t',x_0)]f_1(x_0;t_0)\,dx_0$.

Это соотношение дает общую связь между коэффициентом диффузии заряженных частиц в пространстве импульсов и произведением сил парного взаимодействия частиц, усредненным по распределению частиц в 6-мерном фазовом пространстве координат и импульсов в начальный момент времени.

Найдем с помощью формулы (10) коэффициент диффузии по импульсам идентичных заряженных частиц, взаимодействующих по закону Кулона. Выражение для силы, действующей на заряженную частицу, находящуюся в координате $\mathbf{r}$ в момент времени t со стороны частицы, движущейся по траектории $r_1(t,x_0)$, представим в виде

$$\mathbf{F}^{(1)}(\mathbf{r},t;x_0) = -q\,\mathrm{grad}\,\varphi(\mathbf{r},t;x_0) = -q^2\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\frac{1}{R(\mathbf{r},t;x_0)},$$

где $\mathbf{R}(\mathbf{r},t;x_0) = \mathbf{r} - \mathbf{r}_1(t,x_0)$, $x_0 = (\mathbf{r}_0,\mathbf{p}_0)$, $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$, $\mathbf{r}_0$ и $\mathbf{v}_0$ — координата и скорость заряда в начальный момент времени; q, m — заряд и масса частицы; $\varphi(\mathbf{r},t;x_0)$ — потенциал поля в координате $\mathbf{r}$ в момент времени t.

Выражение для корреляционной функции, входящей в уравнение (10), тогда примет вид

$$K_{ij} = q^4\int d\mathbf{p}_0\frac{\partial^2}{\partial x_i\partial x_j'}\int\limits_V\frac{f_1(x_0)\,d\mathbf{r}_0}{R(\mathbf{r},t;x_0)R(\mathbf{r}',t';x_0)}, \qquad (11)$$

где x_i, x_j' — декартовы компоненты вектора $\mathbf{r}$ и $\mathbf{r}'$ соответственно, интеграл по $\mathbf{r}_0$ берется по объему, занимаемому частицами.

Будем предполагать, что рассматриваемая система является однородной в пространстве, т. е. одночастичная функция распределения не зависит от $\mathbf{r}_0$. Рассматривая промежутки времени, за которые движение зарядов существенно не изменяется, уравнение траектории отдельной частицы представим в виде $\mathbf{r}_1(t, x_0) = \mathbf{r}_0 + \mathbf{v}_0(t - t_0)$. В уравнении (11) в интеграле по объему, вводя вместо $\mathbf{r}_0$ новые переменные $\mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r}_0 - \mathbf{v}(t - t_0)$, придем к интегралам вида

$$K_{ij} = q^4 \int J_{ij}(\xi) f_1(\mathbf{p}_0)\, d\mathbf{p}_0, \tag{12}$$

$$J_{ij} = -\frac{\partial^2}{\partial \xi_i \partial \xi_j} \int\limits_V \frac{d\mathbf{R}}{R|\mathbf{R} - \xi|}, \tag{13}$$

где $\xi = \mathbf{r} - \mathbf{r}' - \mathbf{v}_0(t - t')$, а также учитываем, что $\partial/\partial x_i = \partial/\partial \xi_i$, $\partial/\partial x'_j = -\partial/\partial \xi_j$.

Для интегрирования по объему в уравнении (13) введем сферическую систему координат R, ϑ, φ, с центром в $\mathbf{R} = 0$ и с полярной осью, параллельной ξ. Будем предполагать, что границы области, занимаемой зарядами, уходят на бесконечность $R_m \to \infty$, когда число частиц $N \to \infty$, а плотность частиц $n = N/V$ остается постоянной. Используя тот факт, что значение интеграла по объему в правой части уравнения (13) достаточно найти с точностью до константы, не зависящей от ξ, получим:

$$J_{ij} = -2\pi \lim_{R_m \to \infty} \frac{\partial^2}{\partial \xi_i \partial \xi_j} \int\limits_0^{R_m} R\,dR \int\limits_0^{\pi} \frac{\sin\vartheta\, d\vartheta}{\sqrt{R^2 - 2R\xi\cos\vartheta + \xi^2}} = 2\pi \frac{\partial^2}{\partial \xi_i \partial \xi_j} \xi. \tag{14}$$

Для нахождения зависимости правой части уравнения (10) от скорости частиц заменим $\mathbf{r}$ и $\mathbf{r}'$ в уравнении (14) координатами пробного заряда в моменты времени t и t', соответственно: $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1(t, x_{0p}) = \mathbf{r}_{0p} + \mathbf{v}(t - t_0)$, $\mathbf{r}' = \mathbf{r}_1(t', x_{0p})$, где $\mathbf{r}_{0p}$, $\mathbf{v}$ — координата и скорость пробного заряда в начальный момент времени. В результате такой замены выражение (14) примет вид

$$J_{ij} = \frac{2\pi}{|t - t'|} \frac{\partial^2}{\partial v_i \partial v_j} |\mathbf{v} - \mathbf{v}_0|, \tag{15}$$

где мы учли, что $\xi = (\mathbf{v} - \mathbf{v}_0)(t - t')$ и $\partial/\partial \xi_i = \partial/(t - t')\partial v_i$.

Подставляя теперь выражение (12) в (10), с учетом (15) получим

$$D_{ij} = 2\pi q^4 \int d\mathbf{p}_0 f_1(\mathbf{p}_0) \frac{u^2 \delta_{ij} - u_i u_j}{u^3} \int\limits_0^{\tau} \frac{d\tau'}{\tau'}, \tag{16}$$

где $\mathbf{u} = \mathbf{v} - \mathbf{v}_0$; $\tau = t - t_0$; $\tau' = t - t'$; δ_{ij} — символ Кронекера.

В уравнении (16) интеграл по τ' расходится на нижнем пределе. Причина этого заключается в том, что при $t = t'$ координата пробной частицы будет равна координате одной из частиц, в поле которых она находится. При этом один из сомножителей в знаменателе подынтегрального выражения (13) обращается в ноль. Для устранения этой расходимости представим потенциал поля в координате $\mathbf{r}'$, создаваемого точечным зарядом, движущимся по траектории $\mathbf{r}_1(t', x_{0p})$, в виде:

$$\varphi(\mathbf{r}', t'; x_0) = \frac{q}{\sqrt{R^2(\mathbf{r}', t'; x_0) + r_{\min}^2}},$$

где $r_{\min}$ — минимальное расстояние, на которое могут сближаться две частицы.

Выражение для J_{ij}, входящее в уравнение (12), тогда примет вид:

$$J_{ij} = -\frac{\partial^2}{\partial\xi_i\partial\xi_j}\int\limits_V \frac{d\mathbf{R}}{R\sqrt{(\mathbf{R}-\xi)^2 + r_{\min}^2}}.$$

Интегрируя по объему в правой части этого уравнения так, как это делается в уравнении (14), найдем

$$J_{ij} = 2\pi\biggl(\delta_{ij} - 3\frac{u_i u_j}{u^2}\biggr)\left(\frac{\sqrt{\xi^2 + r_{\min}^2}}{\xi^2} - \frac{r_{\min}^2}{\xi^3}\ln\frac{\xi + \sqrt{\xi^2 + r_{\min}^2}}{r_{\min}}\right) + \frac{4\pi u_i u_j}{u^2\sqrt{\xi^2 + r_{\min}^2}}, \qquad (17)$$

где $\xi = u(t - t')$.

Подставляя теперь выражения (12) и (17) в уравнение (10) и проинтегрировав по t', находим:

$$\frac{d}{dt}\langle\Delta p_i\Delta p_j\rangle = 4\pi q^4\int d\mathbf{p}_0 f_1(\mathbf{p}_0)\biggl[\biggl(\delta_{ij} - 3\frac{u_i u_j}{u^2}\biggr)\frac{A(\zeta)}{u} + 2\frac{u_i u_j}{u^3}\ln\Bigl(\zeta + \sqrt{\zeta^2+1}\Bigr)\biggr], \qquad (18)$$

где $\zeta = u\tau/r_{\min}$, $A(x) = (1 + 1/2x^2)\ln(x + \sqrt{x^2+1}\,) - \sqrt{x^2+1}/2x$.

Рассмотрим два предельных случая — разброс по импульсам на начальном этапе эволюции системы, когда время τ мало́ по сравнению с некоторым характерным временем хаотизации движения частиц τ_0, и диффузию частиц в импульсном пространстве на временах, бо́льших τ_0. Здесь $\tau_0 = r_{\min}/\overline{u}$, где $\overline{u}$ — средняя скорость частиц.

При $\tau \ll \tau_0$, удерживая в правой части уравнения (18) линейные поправки по ζ, получим:

$$\frac{d}{dt}\langle\Delta p_i\Delta p_j\rangle = \frac{8\pi q^4\tau}{3r_{\min}}\int d\mathbf{p}_0 f_1(\mathbf{p}_0)\delta_{ij} = \frac{8\pi q^4}{3r_{\min}}n\tau\delta_{ij}. \qquad (19)$$

Видно, что разброс по импульсам в этом случае является симметричным, а средний квадрат отклонения импульса увеличивается пропорционально квадрату времени

$$\langle(\Delta p)^2\rangle = \frac{4\pi q^4}{r_{\min}}n\tau^2. \qquad (20)$$

Описываемый формулами (19) и (20) процесс увеличения разброса по импульсам соответствует предброуновскому движению заряженных частиц.

В противоположном предельном случае при $\tau \gg \tau_0$, представляя подынтегральное выражение в уравнении (18) в виде асимптотического разложения по ζ, находим:

$$D_{ij} = 2\pi q^4\int d\mathbf{p}_0 f_1(\mathbf{p}_0)\biggl[\biggl(\delta_{ij} - 3\frac{u_i u_j}{u^2}\biggr)\frac{1}{u}\biggl(\Lambda - \frac{1}{2}\biggr) + 2\frac{u_i u_j}{u^3}\Lambda\biggr],$$

где $\Lambda = \ln(2u\tau/r_{\min})$.

При $\Lambda \gg 1$ из этой формулы легко получить коэффициент диффузии

$$D_{ij} = 2\pi q^4\int d\mathbf{p}_0 f_1(\mathbf{p}_0)\Lambda\frac{u^2\delta_{ij} - u_i u_j}{u^3},$$

совпадающий с коэффициентом диффузии в импульсном пространстве для случая кулоновского взаимодействия нерелятивистских заряженных частиц [1]. Если за время τ протекания рассматриваемого процесса диффузии в результате теплового разлета заряженные частицы достигают границы R_m области, которую они занимают, то при $u\tau > R_m$ в выражении для Λ величину $u\tau$ следует заменить на R_m. Заметим, что в классическом случае минимальное расстояние между частицами определяется как $r_{\min} = q^2/m\overline{u}^2$.

Автор благодарен С. В. Пелетминскому за полезные обсуждения результатов работы.

1. *Ландау Л. Д.* Кинетическое уравнение в случае кулоновского взаимодействия // Журн. эксперим. и теорет физики. – 1937. – **7**, № 2. – С. 203–209.
2. *Боголюбов Н. Н.* Проблемы динамической теории в статистической физике. – Москва: Гостехиздат, 1946. – 119 с.

ННЦ "Харьковский физико-технический институт"
Поступило в редакцию 23.07.2012

В. В. Огнівенко

Динамічне виведення коефіцієнта дифузії за імпульсами кулонівськи взаємодіючих заряджених частинок

Одержано вирази для коефіцієнтів дифузії частинок у просторі імпульсів на основі динаміки руху частинок. Загальні формули використовуються для визначення середньоквадратичного розкиду за імпульсами нерелятивістських заряджених частинок, взаємодіючих за законом Кулона, на часах, менших за час хаотизації руху частинок, та більших, коли рух є повністю випадковим.

V. V. Ognivenko

Dynamical derivation of the diffusion coefficient by momenta of Coulomb-interacting charged particles

Expressions for the diffusion coefficients in the momentum space for particles are derived on the basis of the motion dynamics of particles. The general formulas are used to obtain estimations of the mean square momentum spread of nonrelativistic charged particles interacting by the Coulomb law for the time less than the motion chaotization time of particles and for the greater one when the motion is completely random.