

## ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие . . . . .	10
<b>Глава 1. Физика плотных газов, неидеальной плазмы и экстремальных состояний вещества . . . . .</b>	<b>13</b>
1.1. Теория плотных газов . . . . .	13
1.2. Физика классических плотных газов . . . . .	15
1.2.1. Уравнение состояния Ван-дер-Ваальса и взаимодействий . . . . .	15
1.2.2. Статистическая теория плотного классического газа . . . . .	19
1.3. Квантовая физика неидеального газа . . . . .	22
1.3.1. Корреляции в газах Бозе–Эйнштейна и Ферми–Дирака . . . . .	22
1.3.2. Квантовая статистика взаимодействующих газов . . . . .	25
1.4. Ионная жидкость и плотная низкотемпературная плазма . . . . .	27
1.4.1. Кулоновские силы и теория Дебая–Хюккеля–Вигнера . . . . .	27
1.4.2. Ионизационное и ассоциативное равновесия . . . . .	30
1.5. Квантовая статистика кулоновских систем . . . . .	34
1.5.1. Квантовые взаимодействия, экранирование и регуляризация . . . . .	34
1.5.2. Кулоновские фазовые переходы . . . . .	42
1.6. Развитие методов численного моделирования . . . . .	45
1.6.1. Алгоритм Метрополиса . . . . .	45
1.6.2. Методы Монте-Карло и молекулярной динамики . . . . .	46
1.7. Теория переноса для неидеальных газа и плазмы . . . . .	47
1.7.1. Расширение теории Больцмана на плотный газ . . . . .	47
1.7.2. Кинетическая теория плотной плазмы . . . . .	48
1.8. Плотные газ и плазма в лаборатории и на Солнце . . . . .	51
1.8.1. Исследования явлений ионизации . . . . .	51
1.8.2. Создание жидкостей с экстремально высокой плотностью энергии . . . . .	55
1.9. Релятивистская плазма и вещество с экстремальной плотностью энергии . . . . .	62
1.9.1. Релятивистская, субадронная и кварк-глюонная плазма . . . . .	62
1.9.2. Плазма, созданная пучками релятивистских частиц . . . . .	68
1.10. Плотные газ и плазма в астрофизике . . . . .	69
1.10.1. Экстремально высокие плотности энергии в астрофизике . . . . .	69
1.10.2. Релятивистская плазма в нашей Вселенной . . . . .	71
Список литературы к гл. 1 . . . . .	77
<b>Глава 2. Сильные корреляции и уравнение состояния плотного газа . . . . .</b>	<b>83</b>
2.1. Классические функции молекулярного распределения и разложения плотности . . . . .	83
2.1.1. Функции распределения и соотношения Орнштейна–Цернике . . . . .	83
2.1.2. Вириальные разложения . . . . .	86

2.2. Методы интегральных уравнений и прототипные системы твердых сфер . . . . .	86
2.2.1. Уравнение Перкуса–Йевица и гиперцепное уравнение . . . . .	86
2.2.2. Системы твердых сфер и жидкие смеси . . . . .	88
2.3. Квантовые эффекты . . . . .	90
2.3.1. Газы Бозе–Эйнштейна и Ферми–Дирака . . . . .	90
2.3.2. Разложения плотности с учетом эффектов взаимодействия . . . . .	91
2.4. Парные корреляции и метод Бета–Уленбека . . . . .	93
2.4.1. Суммы Слэтера для пар и второй вириальный коэффициент . . . . .	93
2.4.2. Представление Бета–Уленбека для реальных газов . . . . .	95
2.5. Представления в большом каноническом ансамбле . . . . .	97
2.5.1. Разложения по фугативности . . . . .	97
2.5.2. Разложения по фугативности и химическая картина . . . . .	99
2.6. Сильные обменные корреляции в газе Ферми–Дирака . . . . .	102
2.6.1. Парные корреляции и термодинамика . . . . .	102
2.6.2. Вклады Хартри–Фока . . . . .	106
2.7. Квантовая статистика прототипного газа Юкавы . . . . .	110
2.7.1. Теория возмущений для парных операторов плотности . . . . .	110
2.7.2. Разложений возмущений для свободной энергии . . . . .	112
2.8. Аналитические свойства термодинамических функций систем Юкавы . . . . .	114
2.8.1. Связанные состояния и аналитические свойства . . . . .	114
2.8.2. Точные вириальные коэффициенты и термодинамические функции . . . . .	118
2.9. Сильно коррелированный бозе-газ при низких температурах . . . . .	121
2.9.1. Невзаимодействующие бозе-газы . . . . .	121
2.9.2. Взаимодействующие бозе-газы и фазовые переходы . . . . .	124
Список литературы к гл. 2 . . . . .	129
<b>Глава 3. Классические кулоновские системы — задачи экранирования . . . . .</b>	<b>133</b>
3.1. Классические системы с кулоновскими взаимодействиями . . . . .	133
3.1.1. Дальнодействие кулоновских взаимодействий — экранирование . . . . .	133
3.1.2. Разложения по плазменному параметру и прототипные модели . . . . .	137
3.1.3. ОКП плазма и модель ионных сфер . . . . .	139
3.2. Системы заряженных твердых сфер . . . . .	143
3.2.1. Приближение Дебая–Хюккеля . . . . .	143
3.2.2. Среднее сферическое и гиперцепное приближения . . . . .	144
3.3. Химический потенциал и коэффициенты активности . . . . .	145
3.3.1. Расчеты свойств индивидуальных ионов . . . . .	145
3.3.2. Кластерные разложения для твердых заряженных сфер . . . . .	150
3.3.3. Активности в среднем сферическом приближении . . . . .	154
3.4. Эффекты ионной ассоциации . . . . .	156
3.4.1. Слабые эффекты ассоциации в 2-2 электролитах . . . . .	156
3.4.2. Химическое описание ассоциации ионов — теория Бьеррума . . . . .	162
3.5. Усовершенствованные модели ионов . . . . .	164
3.5.1. Потенциалы типа Герни–Фридмана . . . . .	164
3.5.2. Нелинейная теория Дебая–Хюккеля . . . . .	166

3.6. Фазовые переходы в классической плазме и ионной жидкости. . . . .	168
3.6.1. Простые модели переходов в классической жидкости . . . . .	168
3.6.2. Переходы в классических ионных системах . . . . .	170
3.7. Коллективные моды в классической плазме . . . . .	173
Список литературы к гл. 3 . . . . .	176
<b>Глава 4. Квантовые кулоновские системы — связанные состояния и проблемы ионизации . . . . .</b>	<b>182</b>
4.1. Квантовая теория экранирования Дебая–Хюккеля . . . . .	182
4.1.1. Квантовое приближение Дебая–Хюккеля . . . . .	182
4.1.2. Прототипные плазменные модели и приближение приведенной массы (ППМ) . . . . .	184
4.2. Слэтеровские функции и приближение эффективного потенциала . . . . .	188
4.2.1. Приближение эффективного потенциала Кельбга–Дейча . . . . .	188
4.2.2. Дополнение поправками Вигнера–Онзагера . . . . .	194
4.3. Дополнения коллективных мод. . . . .	198
4.3.1. Статистическая сумма в коллективных координатах . . . . .	198
4.3.2. Приложение к однокомпонентной квантовой плазме . . . . .	200
4.4. Ионизационное равновесие между атомами, электронами и ионами . . . . .	201
4.4.1. Уравнение Эггерта–Саха для идеальной плазмы . . . . .	201
4.4.2. Регуляризация атомной статистической суммы . . . . .	203
4.5. Связанные состояния и ионизационное равновесие в неидеальной плазме . . . . .	206
4.5.1. Слабо-неидеальные уравнения состояния и уравнение Саха . . . . .	206
4.5.2. Неидеальность в атомных статистических суммах . . . . .	209
4.6. Корреляции в плазме благородных газов и щелочной плазме. . . . .	214
4.6.1. Эффективные потенциалы для плазмы благородных газов и щелочной плазмы . . . . .	214
4.6.2. Корреляции и термодинамические функции . . . . .	217
4.7. Фазовые переходы первого рода в ионизованных газах. . . . .	221
4.7.1. Модели Ван-дер-Ваальса и квантовые эффекты . . . . .	221
4.7.2. Учет эффектов Кулона и Ван-дер-Ваальса . . . . .	223
4.8. Приближенная оценка критических точек в КПДХ и ПЭПК. . . . .	226
4.9. Обсуждение плазменных переходов в теории и эксперименте . . . . .	229
Список литературы к гл. 4 . . . . .	232
<b>Глава 5. Кулоновские корреляции и уравнение состояния невырожденной неидеальной плазмы . . . . .</b>	<b>241</b>
5.1. Короткодействующие квантовые эффекты в плазме низкой плотности. . . . .	241
5.1.1. Парные взаимодействия . . . . .	241
5.1.2. Потенциал Кельбга . . . . .	244
5.2. Экранирование в слабо неидеальной плазме. . . . .	245
5.2.1. Экранированные корреляции в невырожденной плазме . . . . .	245
5.2.2. Парные корреляции в многокомпонентных системах . . . . .	247
5.3. Недиagonальные парные операторы плотности. . . . .	249
5.3.1. Диагональная и недиагональная парная матрица плотности . . . . .	249
5.3.2. Обсуждение недиагональных эффективных потенциалов . . . . .	253
5.4. Квантовые поправки в термодинамике. . . . .	256
5.4.1. Поправки первого порядка к результатам классической ОКП . . . . .	256
5.4.2. Вклады экранирования высших порядков . . . . .	258

5.4.3. Экранирование в слабокоррелированных смесях . . . . .	261
5.5. Вириальное разложение в приближении приведенной массы . . . . .	263
5.5.1. Свободная энергия и давление в ППМ . . . . .	263
5.5.2. Совместимость с подходом закона действующих масс . . . . .	266
5.6. Разложения низкой плотности для кулоновских систем . . . . .	268
5.6.1. Вириальные разложения для произвольных отношений масс . . . . .	268
5.6.2. Экранированные кластерные интегралы . . . . .	269
5.7. Точные кулоновские вириальные функции второго порядка . . . . .	270
5.7.1. Обменный вклад в кулоновские вириальные функции . . . . .	270
5.7.2. Прямые вклады в кулоновские вириальные функции . . . . .	273
5.8. Обсуждение вириальных функций и термодинамических потенциалов . . . . .	276
5.8.1. Аналитические свойства вириальных функций . . . . .	276
5.8.2. Вириальное разложение термодинамических функций . . . . .	278
Список литературы к гл. 5 . . . . .	283
<b>Глава 6. Разложения по фугитивности и связанные состояния в плазме . . . . .</b>	<b>289</b>
6.1. Разложения по фугитивности термодинамических функций . . . . .	289
6.1.1. Кластерные разложения в фугитивности . . . . .	289
6.1.2. Представления фугитивности и уравнение Саха . . . . .	292
6.2. Комбинации канонических и больших канонических разложений по плотности . . . . .	296
6.2.1. Структура вкладов низшего порядка в разложении по плотности . . . . .	296
6.2.2. Структура вкладов высшего порядка . . . . .	300
6.3. Комбинированные разложения по плотности — фугитивности . . . . .	301
6.3.1. Частичное суммирование рядов плотности . . . . .	301
6.3.2. Расширенные представления уравнений состояния нелинейными функциями плотности . . . . .	305
6.4. Эффекты неидеальности в энергетическом спектре . . . . .	311
6.4.1. Сдвиги энергии в эффективных волновых уравнениях . . . . .	311
6.4.2. Давление Хартри–Фока–Вигнера при высокой плотности . . . . .	318
Список литературы к гл. 6 . . . . .	323
<b>Глава 7. Уравнения состояния сильно связанной частично ионизированной плазмы . . . . .</b>	<b>327</b>
7.1. Модели кулоновской жидкости и энергия электрического поля . . . . .	328
7.1.1. Корреляции электрического поля и кулоновская энергия . . . . .	328
7.1.2. Кулоновская энергия очень плотных электронных жидкостей . . . . .	331
7.2. Химический потенциал и кулоновская энергия плотных электрон-ионных жидкостей . . . . .	335
7.2.1. Приближение приведенной массы и другие приближения . . . . .	335
7.2.2. Эффекты Вигнера при решении гиперцепных уравнений . . . . .	339
7.3. Кулоновская свободная энергия плотных электрон-ионных жидкостей . . . . .	344
7.3.1. Основные вклады в кулоновскую свободную энергию . . . . .	344
7.3.2. Представления Паде кулоновской свободной энергии . . . . .	345
7.4. Усовершенствованные химические модели, включающие связанные состояния . . . . .	346
7.4.1. Свободная энергия в химической модели . . . . .	346

7.4.2. Геометрия ландшафта свободной энергии . . . . .	354
7.5. Термодинамика плазмы высокого давления . . . . .	356
7.5.1. Усовершенствованные химические модели с энергетическими сдвигами . . . . .	356
7.5.2. Методы минимизации свободной энергии . . . . .	360
7.6. Водородоподобная и гелиеподобная плазма при сверхвысоких давлениях . . . . .	364
7.6.1. Водород и дейтерий — адиабаты Гюгонио и изоэнтропы . . . . .	364
7.6.2. Плазма гелия и других легких элементов . . . . .	374
Список литературы к гл. 7 . . . . .	377
<b>Глава 8. Кинетические уравнения и флуктуации в неидеальных газах и плазме . . . . .</b>	<b>385</b>
8.1. Стохастическая кинетика . . . . .	385
8.1.1. Уравнение Смолуховского–Фоккера–Планка и управляющее уравнение . . . . .	385
8.1.2. Стохастическая кинетика Паули и Толмена . . . . .	390
8.2. Квантовая кинетика и теория переноса . . . . .	395
8.2.1. Лоренцевская кинетика и релаксационное приближение . . . . .	395
8.2.2. Квантовая кинетическая теория Боголюбова . . . . .	397
8.3. Необратимость, энтропия Больцмана и Кульбака. H-теорема . . . . .	400
8.3.1. Энтропия и динамика Паули . . . . .	400
8.3.2. H-теорема . . . . .	402
8.4. Флуктуационно-диссипативные соотношения . . . . .	403
8.4.1. Классические соотношения . . . . .	403
8.4.2. Квантовые флуктуационно-диссипационные соотношения . . . . .	405
8.5. Флуктуации плазмы и кинетические уравнения . . . . .	406
8.5.1. Квантовые корреляции электрического поля . . . . .	406
8.5.2. Кинетические уравнения и флуктуационно-диссипационные соотношения . . . . .	408
Список литературы к гл. 8 . . . . .	411
<b>Глава 9. Прыжковая кинетика, квантовая динамика и перенос . . . . .</b>	<b>415</b>
9.1. Прыжковая кинетика электронов . . . . .	415
9.1.1. Прыжковая динамика электронов в моделях с сильной связью . . . . .	415
9.1.2. Динамика Паули прыжков электронов с сильной связью . . . . .	420
9.2. Временные корреляции и линейный отклик . . . . .	421
9.2.1. Временные корреляции в приближении сильной связи . . . . .	421
9.2.2. Теория линейного отклика . . . . .	423
9.3. Молекулярная динамика с эффективными потенциалами . . . . .	426
9.3.1. Простые модели эффективных взаимодействий . . . . .	426
9.3.2. Молекулярная динамика с потенциалами типа Кельбга . . . . .	427
9.4. Вигнеровская динамика с импульсно-зависимыми потенциалами . . . . .	429
9.4.1. Взаимодействия, зависящие от импульса . . . . .	429
9.4.2. Потенциал Дорсо и моделирование плазмы . . . . .	433
9.5. Молекулярная динамика волновых пакетов . . . . .	434
9.5.1. Динамика волновых пакетов почти свободных электронов . . . . .	435
9.5.2. Связанные электроны во внешних полях . . . . .	440
Список литературы к гл. 9 . . . . .	442

<b>Глава 10. Теоретические подходы к квантовым методам Монте-Карло</b> . . . . .	447
10.1. Подход интегралов по траекториям к кулоновским системам и задача методов Монте-Карло . . . . .	447
10.2. Представление термодинамических величин в виде интегралов по траекториям . . . . .	451
10.3. Методы Монте-Карло и алгоритм Метрополиса–Гастингса . . . . .	458
10.4. Метод Монте-Карло для интегралов по траекториям . . . . .	461
10.5. Аналитические исследования матрицы плотности с фиксированными узлами . . . . .	465
Список литературы к гл. 10 . . . . .	473
<b>Глава 11. Моделирование газо-, жидко- и кристалло-образных состояний кулоновских систем</b> . . . . .	477
11.1. Парные корреляционные функции, связанные состояния, давление и внутренняя энергия электронно-дырочной плазмы . . . . .	477
11.2. Термодинамические свойства водородной плазмы . . . . .	490
11.3. Термодинамические свойства водородо-геливых смесей . . . . .	500
11.4. Кулоновская кристаллизация . . . . .	507
Список литературы к гл. 11 . . . . .	522
<b>Глава 12. Вигнеровская формулировка для термодинамики</b> . . . . .	527
12.1. Функция Вигнера в равновесной термодинамике . . . . .	528
12.2. Представление функции Вигнера в виде интеграла по путям . . . . .	529
12.3. «Одноимпульсная» функция Вигнера . . . . .	534
12.4. Линейное и гармоническое приближение . . . . .	537
12.5. Парный псевдопотенциал для обменного взаимодействия . . . . .	541
12.5.1. Идеальный газ . . . . .	541
12.5.2. Учет взаимодействия . . . . .	549
Список литературы к гл. 12 . . . . .	551
<b>Глава 13. Методы Монте-Карло для функции Вигнера</b> . . . . .	552
13.1. Методы Монте-Карло и алгоритм Метрополиса–Гастингса . . . . .	552
13.2. Метод Монте-Карло, основанный на одноимпульсном подходе . . . . .	556
13.2.1. Вычисление средних значений операторов и функций распределения . . . . .	561
13.2.2. Периодические граничные условия . . . . .	563
13.2.3. Подбор параметров и сходимость . . . . .	564
13.3. Методы Монте-Карло, основанные на линейном и гармоническом приближениях . . . . .	566
13.3.1. Вычисление физических величин и распределений . . . . .	570
13.3.2. Подбор параметров и сходимость . . . . .	572
Список литературы к гл. 13 . . . . .	573
<b>Глава 14. Численное моделирование термодинамики в фазовом пространстве</b> . . . . .	574
14.1. Одна частица во внешнем поле . . . . .	574
14.1.1. Одномерный потенциал $V_{2-4}$ . . . . .	574
14.1.2. Одномерный потенциал $V_{3-4}$ . . . . .	577
14.1.3. Одномерный потенциал $V_{SCC}$ . . . . .	580
14.1.4. Трехмерный потенциал $V_{2-4}$ . . . . .	582
14.2. Идеальный фермионный газ . . . . .	584

14.2.1. Проверка метода SMPIMC . . . . .	585
14.2.2. Проверка обменного псевдопотенциала . . . . .	587
14.3. Двухкомпонентные кулоновские системы . . . . .	589
14.3.1. Функции распределения по импульсам . . . . .	590
14.3.2. Внутренняя энергия и давление . . . . .	593
14.3.3. Парные корреляционные функции . . . . .	595
Список литературы к гл. 14 . . . . .	598
<b>Глава 15. Приложения к веществам в экстремальных состояниях</b> . . . . .	<b>600</b>
15.1. Релятивистская статистическая сумма частиц Ньютона–Вигнера в представлении интегралов по траекториям . . . . .	600
15.2. Полуклассическая статистическая сумма релятивистской кварк- глюонной плазмы в цветовом представлении интегралов по траек- ториям . . . . .	610
15.3. Термодинамика кварк-глюонной плазмы . . . . .	622
15.4. Приложение. Интегрирование по мере Хаара группы SU(3) . . . . .	630
Список литературы к гл. 15 . . . . .	632
<b>Глава 16. Транспортные свойства кварк-глюонной плазмы</b> . . . . .	<b>636</b>
16.1. Вигнеровский подход к квантовой динамике . . . . .	636
16.2. Релятивистский квантовый гармонический осциллятор . . . . .	647
16.3. Транспортные свойства кварк-глюонной плазмы . . . . .	657
16.4. Приложение. Дельта-теорема Лебега–Дирака . . . . .	670
Список литературы к гл. 16 . . . . .	670