

高密度プラズマ中の多体相関

岡山大学工学部 東 辻 浩 夫

古典荷電粒子系における多体相関について紹介する。¹ 対象は一種類の荷電粒子と一様な背景電荷の系（一成分プラズマ, OCP）（または数種の同符号の荷電粒子と背景電荷の系（ionic mixture））である。状態としては高密度（強結合）の液体をとりあげる。

OCP には次の様なものがあり、平均距離 a での相互作用エネルギーと熱エネルギー $k_B T$ の比 Γ 、または Landau 長と Debye 長の比 ε が系を特徴づける結合パラメーターである：

3次元 相互作用 e^2/r 結合パラメーター $\Gamma = \varepsilon^{2/3}/3^{1/3} = e^2/k_B T a$

2次元 相互作用 $-e^2 \ln(r/l)$ 結合パラメーター $\Gamma = \varepsilon = e^2/k_B T$

" " e^2/r " $\Gamma = \varepsilon^{1/2}/2^{1/2} = e^2/k_B T a$

(1次元 相互作用 $-e^2/r$ 結合パラメーター $\Gamma = 2\varepsilon^2 = e^2 a/k_B T$)
 但し、1次元のときには厳密解がある。²

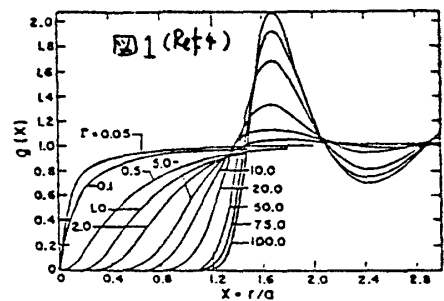
1. 静的相関と相関エネルギー

1.1 2体相関を数

(i) 弱結合 $\Gamma, \varepsilon \ll 1$ のときには、フラスター展開、BBGkY 方程式系の展開などにより、相関を数、相関エネルギーを求めることができる。³ 例えば1粒子当りの相関エネルギー e_c は $e_c/k_B T = -\frac{1}{2}\varepsilon - \frac{1}{4}\varepsilon^2(\ln 3\varepsilon + 2\gamma - \frac{5}{2}) - \frac{1}{8}3\varepsilon^3 \ln \varepsilon + \dots$

(ii) 強結合 モンテカルロ法による数値実験により、相関を数、相関エネルギーが精密に求められている。⁴ 相関を数も図1に示す。 e_c は内挿式 $e_c/k_B T = -0.89752\Gamma + 0.94544\Gamma^{1/2} + 0.17954\Gamma^{-1/2} - 0.00049$ により、よく表される。図みに b.c.c. 格子の Madelung エネルギーは $e_c/k_B T = -0.895729\Gamma$ 。

(iii) 相関エネルギーの厳密な評価 強結合領域の相関を数も、原点にある電荷も、背景電荷がちょうど中和するだけの階段状の穴で近似すると（イオン球モデル⁵）， $e_c/k_B T = -0.9\Gamma$ が得られる。 -0.9Γ は、点電荷も仮想的に球状電荷におきかえた系との比較によ、得られる厳密な下限でもある。⁶ 実は、 e_c も実空間とフーリエ空間の積分の和として表す Ewald の方法を用い、2空間に分割する補助関数として適当なものをとると、2体分布関数の性質 $g(r) \geq 0$ と構造因子の性質 $S(k) \geq 0$ から、下限として -0.93Γ が得られる。⁷ また、古典プラズマでは $S(k)$ は RPA (Debye-Hückel) 近似の通りであり、 $S(k) \geq S(k)_{RPA}$ 、従って $e_c \geq e_c^{RPA}$ である。⁸ 上の方法に $S(k) \geq S(k)_{RPA}$ を用いれば、弱結合から強結合に亘って、実験値とかなり近い下限を得ることができる。⁷ また、



補助関数として、帯電球間の相互作用に対応するものを用いれば更に改良される。⁹ (強結合の漸近値として $\epsilon_c/k_B T \rightarrow -0.9\rho + \frac{1}{2}$ が得られる。) これらの下限の考察は、イオン球モデルの基礎である原点付近の電荷密度を厳密な範囲で明らかにしたものである。これらの結果は、ionic mixture と荷電剛体球系にも応用できる。¹⁰

(iv) HNC 方程式とその改良 強結合 α とともに、結合パラメーターによる展開は有効でないから、液体論で用いられる積分方程式を適用することが考えられる。積分方程式のうち、HNC 方程式が、実験値に近い相関関数、相関エネルギーを与える¹¹: $\epsilon_c/k_B T \approx -0.9005\rho + 0.2688\rho^{1/2} + 0.0719\rho^2 + 0.05379$ 。一方、種々の相互作用ポテンシャルに対する HNC 方程式の解と数値実験とを比較して、HNC 方程式では零とおかしているブリッジグラフといわれる一群のグラフスター (解析的評価は難しい¹²) の寄与について次の様な事実が帰納的に分かった¹³: ブリッジの寄与も剛体球系のもので表し、剛体球の充填率を自由パラメーターとして、熱力学的な矛盾がない様に充填率を決めると、短距離型から長距離型まで (OCP を含めて) 数値実験結果と殆んど再現できる。また最近、OCP について、HNC 方程式と 3 体相関との関係から、ブリッジの寄与を求め、数値実験と合う 2 体相関が計算されている。¹⁴ (1.2 (iv) 参照)

(v) ionic mixture 数値実験、連立 HNC 方程式により、相関関数、相関エネルギーが求められている。¹⁵ 結果の特徴は、混合系のエネルギーが、各成分が一様系であるときエネルギーも混合比に従って線型に加えられるものに殆んど等しいことである。従って、相分離が実際の系 (例えば、重い惑星の内部) でどう起るかを解析するには、ここでは一様な背景 (Fermi sea) として扱った縮退電子の応答の寄与が重要となる。¹⁵

1.2 3 体相関関数

3 体分布関数 $f_3(123)$ は、3 体相関関数 $C_3(123)$ を、 $C_3(123) = f_3(123) - 1 - \sum_{ij} h_{ij}(12)$, $h_{ij}(12) = g_{ij}(12) - 1$ は 2 体相関関数、と定義する。

(i) 弱結合 このときには、BBGKY 方程式系を展開して、 $r_{12}, r_{23}, r_{31} \gg e^2/k_B T$ のとき $C_3 \approx \sum_{ij} h_{ij}^{DH}(12) h_{ij}^{DH}(23) + n \int d\mathbf{r} h_{ij}^{DH}(14) h_{ij}^{DH}(23) h_{ij}^{DH}(34)$, $1, 2, 3$ のうち 1 つだけ遠方なとき $C_3 \approx \sum_{ij} h_{ij}^{DH'}(12) h_{ij}^{DH'}(23) + h_{ij}^{DH'}(12) h_{ij}^{DH'}(23) h_{ij}^{DH'}(31)$, となることが分る。¹⁶ ここで、 h^{DH} は Debye-Hückel 近似の 2 体相関、 $h^{DH'}$ は $\exp(h^{DH})$ (近距離では $\exp(-e^2/k_B T r)$ となる) である。また、3 体相関の相関エネルギーへの寄与は $O(\epsilon^2)$ であり、遠方の振舞いによって決まる。

(ii) 中間結合 弱結合での C_3 の形から、 $C_3 = \sum_{ij} h_{ij} h_{ij} + n \int d\mathbf{r} h_{ij} h_{ij} h_{ij}$ を仮定して、 h を照撞着に解く方法が示唆される。結果は、図 2 の様に、相関エネルギー、相関関数を再現する。¹⁷ 従って 3 体相関関数は、この式で近似的に表されると考えられる。

(iii) 強結合 この領域では、通常の液体と同様に、Kirkwood の平均化近似 (SA), たたみ込み近似 (CA) など 3 体相関関数を表すことが考えられる。(ii) の形は CA に他ならない。最近、数値実験に

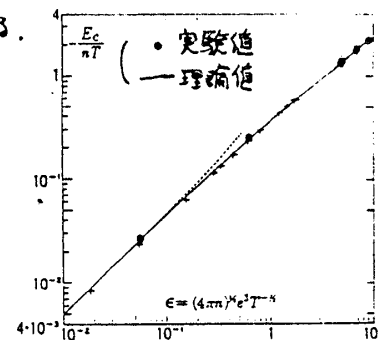
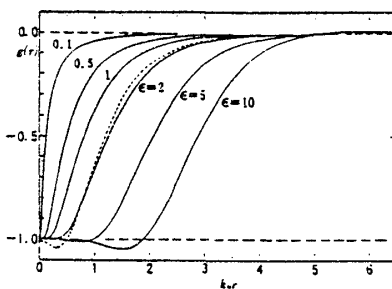
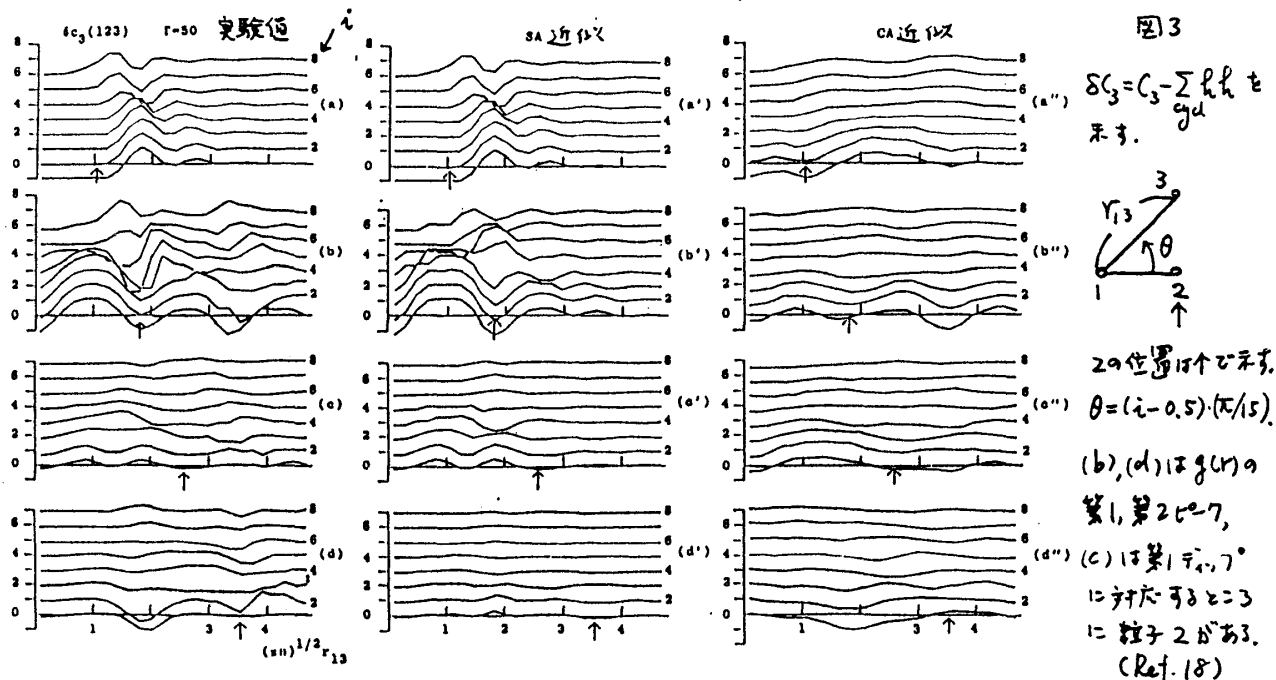


図 2 (Ref. 17)

より直接 C_3 を求め、SA, CA との比較が行われている。¹⁸ 図3に2次元のOCP(相互作用は $-e^2 \ln(r/r_0)$) の場合を示す。これによると、3粒子が2体相関の第1ピークに対応する距離を辺とする正三角形状の配置となる確率は、SAにより(誇張されているが)表され、CAによらず表されない。一方、上の距離だけ離れて3粒子が直線上に並ぶ配置に対応する確率は、CAによらず、よりよく表されている。実験の制約から、非常に遠方の様子は分らないが、3粒子が互に遠方々々ときにはCAにより、3粒子中2つが近くにあるときにはSAにより、3体相関の数が近似される傾向が明らかである。



(iv) HNC 方程式の改良 最近、HNC方程式が、3体及び高次の相関の数を対してたまたみ込み近似を行うことに対応することが示され、3体相関にCA以外の要素を取り入れることにより、ブリッジ関数を求め、HNC方程式を改良することが行われた。¹⁴ f_3 は $\frac{1}{N} \int d\mathbf{r}_3 f_3(123) = \frac{N-2}{N} g(12)$ を満す様にSAの寄与を入れると、強結合領域に亘って数値実験とよい一致が得られている。

2. 動的相関 (講演では省略したが、簡単に記す。)

動的(2体)相関は密度揺動スペクトル $S(k, \omega)$ と運動量密度揺動 $\vec{g}_k(t) = \sum_{i=1}^N m \vec{v}_i(t) \exp[-ik \cdot \vec{r}_i(t)]$ のスペクトル $\vec{C}(k, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle \vec{g}_k(t) \vec{g}_k^\dagger(t=0) \rangle$ により表される。

2.1 線の揺動

(i) 弱結合 長波長極限では、よく定義されたプラズマ揺動が存在する。揺動数は $\omega(k) + i\omega''(k)$ とすると、 $\omega(k)/\omega_p \approx 1 + (\frac{3}{2} + \delta)(k/k_0)^2$ (k_0 は Debye 波数), $\omega''(k)/\omega_p \approx (\text{Landau damping}) + \gamma(k/k_0)^2$ である。 δ は $O(\epsilon)$ であるが、比例係数は符号を含めて確定していない。¹⁹ γ は $\epsilon \ln \epsilon$ に比例し、係数は容易に求まる。 δ の符号について、 γ を用いて Kramers-Kronig の関係から正であることも導出できる。²⁰

(ii) 強結合 Γ の増大と共に、 $(\frac{3}{2} + \delta)$ は負となる。また、よく定義されたプラズマ揺動の存在する波数領域が広がる。²¹ $S(k, \omega)$ の揺動数モーメントに因する和則から、長波長領域で

は、 $S(k, \omega)$ の中にプラズマ振動、熱励起 (特性振動数 $k(k_B T/m)^{1/2}$) の他に衝突励起 (特性振動数 ω_p/ε) と呼ぶべき成分があることが分る。¹⁹ $S(k, \omega)$ の大よその振舞は、記憶関数を用いた表示 (Mori) により再現することができる。²¹ 図4に $S(k, \omega)$ 、図5に $\omega(q)$ を示す。

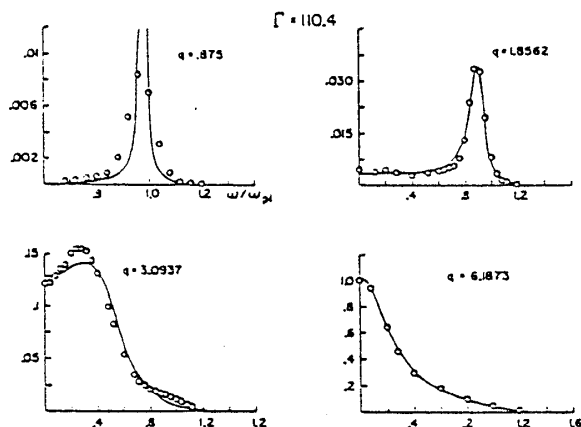


図4
 $S(k, \omega)$
(○ 実験値
— 記憶関数による表示
(Ref. 21))

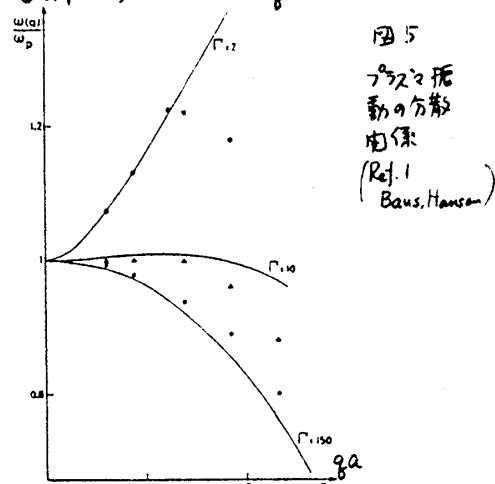


図5
プラズマ振動の分散関係
(Ref. 1 Baus, Hansen)

2.2 横の振動

$S(k, \omega)$ のうちの横の成分は、弱結合では構造をもたないが、強結合では液体の横モードに対応する構造をもつことが予想される。実際には、波数のかなり広い範囲で、2つのピークが現れる。記憶関数を用いた表示では、この振舞も再現できない。²¹ これまでに、2ピークの構造も再現できたのは、モード結合理論である。²² 図6に示す。しかし、理論では3ピークになる領域もあり、あいまいさも残っていて、実験事実の説明として確立しているとは言えない様である。

2.3 2次元 OCP (相互作用は e^2/r) の振動スペクトル

2.1, 2.2 は3次元 OCP について分子動力学法によって得られたスペクトルであるが、2次元 OCP についてもスペクトルが得られている。²³ 縦の振動スペクトルの振舞は、次元の違いを除けば2.1と同様である。一方、横の振動スペクトルは、低振動数の肩 → 2ピーク → 高振動数のピークと変化し、高振動数のピークが特に顕著である。図7に示す。また、振動数に関する和別から、高振動数のピークがある領域では、自己相関 (incoherent) 部分がスペクトルの大部分であることが分る。²⁴ (実験からも確かめられている。²⁵) この様なスペクトルの自己相関の原因としては、縦振動が考えられるが²⁴ 理論的解析は不十分である。

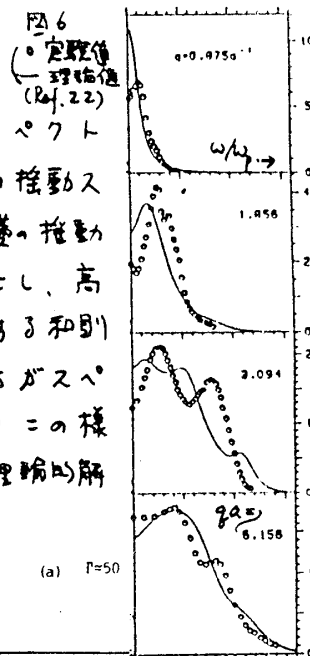
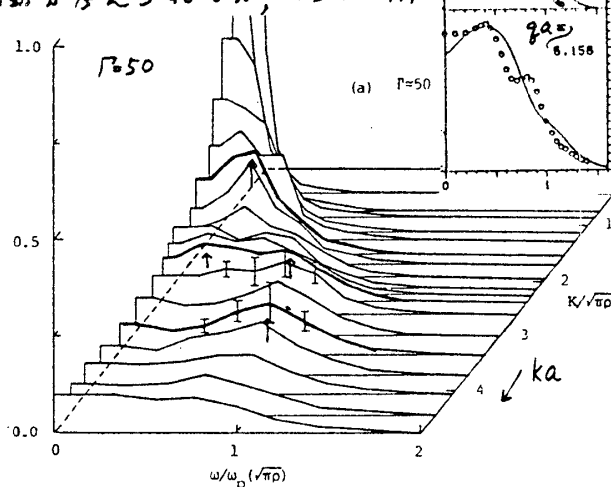


図6
(○ 実験値
— 理論値
(Ref. 22))

図7
2次元 OCP の
横振動スペクトル
(Ref. 25)



文献

1. レビューとして, M. Baus and J.P. Hansen, Phys. Report **59**, 1 (1980), S. Ichimaru, Rev. Mod. Phys. **54**, 1017 (1982) がある。
2. R.J. Baxter, Proc. Cambridge Philos. Soc. **59**, 779 (1963), Phys. Fluids **7**, 38 (1964). H.

- Kunz, Ann. Phys. (N.Y.) 85, 303 (1974).
3. R. Abe, Progr. Theor. Phys. 22, 213 (1959). D.L. Bowers and E. E. Salpeter, Phys. Rev. 119, 1180 (1960). E. G. D. Cohen and T. J. Murphy, Phys. Fluids 12, 1404 (1969).
 4. S. G. Brush, H. L. Sahlin, and E. Teller, J. Chem. Phys. 45, 2102 (1966). J. P. Hansen, Phys. Rev. A8, 3096 (1973). E. L. Pollock and J. P. Hansen, Phys. Rev. A8, 3110 (1973). H. E. DeWitt, Phys. Rev. A14, 1290 (1976). W. L. Stallery, G. D. Doolen, and H. E. DeWitt, Phys. Rev. A21, 2087 (1980); A26, 2255 (1982). (最後の二つでは実験結果の N 依存性を求めたといふ。)
 5. E. E. Salpeter, Aust. J. Phys. 1, 373 (1954).
 6. E. H. Lieb and H. Narukhofer, J. Stat. Phys. 12, 291 (1975); 14, 465 (1976).
 7. H. Totsuji, Phys. Rev. A19, 1712 (1979); A19, 2433 (1979).
 8. N. D. Mermin, Phys. Rev. 171, 272 (1968).
 9. Y. Rosenfeld, Phys. Rev. A25, 1206 (1982).
 10. H. Totsuji, Phys. Rev. A24, 1077 (1981).
 11. K. C. Ng, J. Chem. Phys. 61, 2680 (1974).
 12. C. Deutsch, Y. Furutani, and M. M. Gombert, Phys. Report 69, 85 (1981).
 13. Y. Rosenfeld and N. W. Ashcroft, Phys. Rev. A20, 1208 (1979).
 14. H. Iyetomi and S. Ichimaru, Phys. Rev. A25, 2434 (1982) and to be published.
 15. H. E. DeWitt and W. B. Hubbard, Ap. J. 205, 295 (1976). H. E. DeWitt, J. Physique (Colloque C1) suppl. 37, C1-173 (1978). J. P. Hansen and P. Vieillefosse, Phys. Rev. Lett. 37, 391 (1976). J. P. Hansen, G. M. Torrie, and P. Vieillefosse, Phys. Rev. A16, 2153 (1977). B. Brami, J. P. Hansen, and F. Joly, Physica 95A, 505 (1979) など。
 16. T. O'Neil and N. Rostoker, Phys. Fluids 8, 1109 (1965). T. J. Lie and Y. H. Ichikawa, Rev. Mod. Phys. 38, 680 (1966).
 17. S. Ichimaru, Phys. Rev. A2, 494 (1970). H. Totsuji and S. Ichimaru, Progr. Theor. Phys. 50, 753 (1973); 52, 42 (1974).
 18. H. Totsuji, preprint.
 19. S. Ichimaru, H. Totsuji, T. Tange, and D. Pines, Progr. Theor. Phys. 54, 1077 (1975) および 311 号文献。
 20. 文献 19 および 311 号 preprint.
 21. J. P. Hansen, I. R. McDonald, and E. L. Pollock, Phys. Rev. A11, 1025 (1975).
 22. J. Bosse and K. Kubo, Phys. Rev. Lett. 40, 1660 (1978); Phys. Rev. A18, 2337 (1978).
 23. H. Totsuji and H. Kakeya, Phys. Rev. A22, 1220 (1980).
 24. H. Totsuji, Phys. Lett. 85A, 349 (1981).
 25. H. Totsuji and T. Funahashi, unpublished.