

تابع توزیع شعاعی در نسخه سوم مکانیک آماری تسالیس

محمد امین طباطبایی بافقی؛ دانشگاه آزاد مشهد، دانشکده شیمی

محمد کمالوند*؛ دانشگاه یزد، دانشکده شیمی

علی مرسلی؛ دانشگاه آزاد مشهد، دانشکده شیمی

دریافت: ۹۸/۸/۱۰ پذیرش: ۱۴۰۰/۶/۲۲

چکیده

با توجه به این‌که پدیده‌های بسیار زیادی در طبیعت وجود دارند که رفتار ترمودینامیکی آنها به علت نافزونور بودن با مکانیک آماری رایج بولتزمن-گیبس قابل توضیح نیست، برای تفسیر این پدیده‌ها بسط انتروپی بولتزمن-گیبس ضروری است. در راستای این هدف از مکانیک آماری جدیدی مبتنی بر تعریفی عمومی از انتروپی که توسط تسالیس ارائه شده است، استفاده می‌شود. در این مقاله، در چارچوب مکانیک آماری تسالیس، تابع توزیع شعاعی (RDF) در نسخه سوم تسالیس به دست آمده است. برای این منظور، از تابع توزیع احتمال در نسخه سوم استفاده شده و یک فرم بسته برای RDF در نسخه سوم پیشنهاد شده است. در معادله به دست آمده، تکانه‌ها و مختصات مکانی مستقل هستند. تأثیر شاخص انتروپی q بر تابع توزیع شعاعی سیال لنارد-جونز بررسی شده است. نتایج عددی در چگالی‌های پایین، نشان می‌دهد که با افزایش مقادیر q همبستگی افزایش می‌یابد. افزایش شاخص انتروپی q و افزایش اثر جاذبه ϵ ، تأثیرات مشابهی دارند.

واژگان کلیدی: تابع توزیع شعاعی، مکانیک آماری تسالیس، شاخص انتروپی.

مقدمه

با توجه به موفقیت‌های چشم‌گیر مکانیک آماری بولتزمن - گیبس، به عنوان یک نظریه قدرتمند در ارائه مدل‌های میکروسکوپی مناسب برای توصیف سامانه‌های ترمودینامیکی، در بین پدیده‌های جهان هستی با مواردی مواجه می‌شویم که این آمار قادر به پیش‌بینی و توصیف رفتارهای آنها نیست و لازم است مکانیک آماری دیگری برای تفسیر و توضیح این پدیده‌ها ارائه شود. از جمله موفقیت‌های آمار بولتزمن - گیبس می‌توان به مناسب بودن آن برای توصیف سامانه‌هایی با برهم‌کنش‌های کوتاه‌برد، فرآیندهای تصادفی مارکوفین و سامانه‌هایی که فضای فاز آنها ارگودیک^۱ باشد اشاره کرد [۱-۵]. امروزه پدیده‌های بسیار زیادی شناخته شده‌اند که به علت نافزونور^۲ بودن با مکانیک آماری متداول بولتزمن - گیبس قابل توضیح نیستند. به عنوان مثال می‌توان به سامانه‌هایی با برهم‌کنش‌های دوربرد اشاره کرد که دارای حافظه بلندمدت

* نویسنده مسئول: Kamalvand@yazd.ac.ir

¹ Ergodic.

² Non-extensive.

میکروسکوپی هستند و ساختار چند فرکتالی دارند. سامانه‌های خود گرانشی [۶-۷]، پدیده کیهان‌شناسی تورمی [۸-۹]، نفوذ کوآرک افسون^۱ [۱۰]، توزیع انرژی تابش‌های کیهانی [۱۱]، مطالعه سامانه‌های تصادفی [۱۲-۱۳]، باد خورشیدی [۱۴-۱۵]، آشفتگی ناقص [۱۶]، اتم‌های سرد در شبکه‌های اتلافی نوری [۱۷]، پدیده ظرفیت گرمایی منفی [۱۸-۱۹]، پدیده سیاه‌چاله‌ها [۲۰]، رفتار نفوذ ناهنجار [۲۱] و فیزیک فرآیندهای پراثری [۲۲-۲۳] و ... نمونه‌هایی هستند که با مکانیک آماری بولتزمن - گیبس قابل توضیح نیستند. بنابراین برای توضیح و تفسیر بسیاری از این پدیده‌ها، بسط انتروپی بولتزمن-گیبس ضروری به نظر می‌رسد. در این جهت بسط‌های متفاوتی از انتروپی بولتزمن - گیبس مانند انتروپی آبه [۲۴]، رنی [۲۵]، خین چین [۲۶]، K-انتروپی^۲ [۲۷]، انتروپی کورادو^۳ [۲۸-۲۹] و غیره، ارائه شده که مناسب‌ترین و کارآمدترین آنها انتروپی تسالیس است. مکانیک آماری نافزونور در سال ۱۹۸۸ توسط تسالیس به منظور بررسی سامانه‌های چند فرکتالی معرفی شد [۳۰]. علاوه بر پدیده‌های ذکر شده در بالا موارد دیگری وجود دارند که توسط مکانیک آماری رایج بولتزمن-گیبس قابل توضیح هستند، ضمن این‌که به طور موفقیت‌آمیزی توسط مکانیک آماری نافزونور نیز بررسی می‌شوند. به عنوان مثال می‌توان به مدل نوسانگر هماهنگ [۳۱-۳۲]، مدل گاز ایده‌آل کلاسیکی [۳۳-۳۴]، سامانه‌های دینامیکی غیرخطی [۳۵-۳۶]، آشوب دوبعدی پلاسما [۳۷]، چگالش بوز-انشتین [۳۸-۳۹]، مدل آیزینگ [۴۰] اشاره کرد.

نظریه‌های پیشرفته‌ای که در زمینه مایعات و سیالات ارائه شده است از مفهوم تابع توزیع شعاعی^۴ (RDF)، بهره گرفته‌اند [۴۱-۴۳]. معمولاً این نظریه‌ها در توصیف رفتار مایعات و مخلوط مایعات کاملاً موفق هستند. RDF نظمی که اتم‌ها در اطراف یک مولکول دارند را نشان می‌دهد. همچنین این تابع متناسب با احتمال یافتن دو اتم که در فاصله $r + \Delta r$ قرار دارند، می‌باشد. تابع توزیع شعاعی ساختار یک مایع را بر حسب احتمال یافتن سایر ذرات در یک فاصله مشخص از اتم مرکزی نشان می‌دهد. برای یک سامانه متشکل از N ذره در حجم V و دمای T ، تابع همبستگی جفت در آمار بولتزمن-گیبس به صورت زیر تعریف می‌شود [۴۳]:

$$g^{(n)}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n) = \frac{1}{\rho^n} \frac{N!}{(N-n)!} \frac{\int \dots \int e^{-\beta U_N} d\mathbf{r}_{n+1} \dots d\mathbf{r}_N}{Z_N};$$

$$Z_N = \int \dots \int e^{-\beta U_N} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \quad (1)$$

که در این معادله ρ چگالی توده‌ای، U_N پتانسیل برهمکنش N ذره‌ای و Z_N انتگرال پیکربندی است. تابع توزیع شعاعی جفت $g^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ برای یک سیال متشکل از مولکول‌های متقارن کروی فقط به فاصله بین مولکول‌های ۱ و ۲، r_{12} ، بستگی دارد. باید توجه داشت که توابع همبستگی علاوه بر فاصله به دما و چگالی سامانه نیز بستگی دارند. یکی از

¹ Diffusion of charm Quark.

² Kaniadakis entropy.

³ Curado entropy.

⁴ Radial Distribution function.

ویژگی‌های مهم تابع توزیع شعاعی در این است که با به‌کارگیری تقریب جمع‌پذیر جفت‌گونه برای پتانسیل برهم‌کنش بین مولکولی، همه خواص ترمودینامیکی مایعات و سیالات چگال بر حسب تابع توزیع شعاعی قابل محاسبه است. تحقیقات گسترده‌ای در زمینه تابع توزیع شعاعی سامانه‌های مایع و سیالات چگال در آمار بولتزمنی شکل گرفته است [۴۴-۴۸]، این در حالی است که گزارش چندانی از بررسی تابع توزیع شعاعی در آمار تسالیس در دست نیست. اخیراً [۴۹]، در چارچوب مکانیک آماری تسالیس تابع توزیع شعاعی در نسخه‌های اول و چهارم استخراج شده‌اند. همچنین یک فرم بسته برای RDF در این نسخه‌ها پیشنهاد شده است. در این مقاله، تابع توزیع شعاعی تسالیس در نسخه سوم تسالیس به دست آمده است. همچنین، تأثیر شاخص انتروپی q ، بر تابع توزیع شعاعی سیال لنارد-جونز تحت چگالی‌های پایین مطالعه شده است. نتایج حاصل در چگالی‌های نزدیک صفر با نسخه‌های قبلی مقایسه شده‌اند. هدف در این مقاله استفاده از تابع احتمال در نسخه سوم تسالیس جهت دستیابی به تابع توزیع شعاعی است. در نسخه سوم، معایب نسخه‌های اول و دوم رفع شده است.

در ادامه این مقاله، ابتدا فرمول‌بندی انتروپی تسالیس و تابع توزیع احتمال در نسخه سوم معرفی می‌شود. در بخش بعد، به فرمول‌بندی نظری تابع توزیع شعاعی در نسخه سوم تسالیس پرداخته می‌شود، همچنین یک فرمول بسته برای RDF در این نسخه پیشنهاد می‌شود. سپس نتایج حاصل از حل عددی تابع توزیع شعاعی در چگالی‌های نزدیک صفر مورد بررسی قرار می‌گیرد. در نهایت، بخش پایانی مقاله به نتیجه‌گیری اختصاص می‌یابد.

فرمول‌بندی انتروپی تسالیس

تعریف انتروپی تعمیم یافته پیشنهاد شده توسط تسالیس، به صورت زیر است [۳۰]:

$$S_q = k \frac{1 - \sum_{i=1}^W p_i^q}{q-1} \quad (\sum_{i=1}^W p_i = 1, q \in \mathbb{R}) \quad (2)$$

در آن k یک ثابت مثبت، W تعداد کل آرایش‌های میکروسکوپی سامانه، p_i احتمال میکروحالت سامانه نام q و شاخص انتروپی و به عبارتی درجه نافزونوری است. باید توجه داشت که در حد $q \rightarrow 1$ انتروپی تسالیس به عبارت مشهور بولتزمن-گیبس-شانون تبدیل می‌شود. اگر A و B ، دو سامانه مستقل از هم باشند، یعنی رابطه $p_{ij}^{(A+B)} = p_i^A \times p_j^B$ ، بین تابع احتمال آنها برقرار باشد، در این صورت S_q انتروپی کل، به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$S_q^{A+B} = S_q^A + S_q^B + \frac{(1-q)}{k} S_q^A S_q^B \quad (3)$$

با توجه به معادله (۳)، انتروپی تسالیس برای سامانه‌های مستقل از هم فزونور و به‌ازای $q \neq 1$ ، انتروپی نافزونور است. شایان ذکر است که در همه موارد $S_q \gg 0$ برقرار است که برای $q < 1$ ، S_q فوق مقداری^۱ و برای $q > 1$ ، زیر مقداری^۲ است [۲].

با استفاده از بیشینه‌سازی تابع انتروپی S_q بر اساس ضرایب نامعین لاگرانژ و با در نظر گرفتن قیدهای $\sum_{i=1}^W p_i = 1$ و $U_q^{(3)} = \frac{\sum_{i=1}^W \varepsilon_i p_i^q}{\sum_{i=1}^W p_i^q}$ (که ε_i مقدار ویژه هامیلتونی سامانه و $U_q^{(3)}$ انرژی درونی تعمیم یافته در نسخه سوم تسالیس است)، توزیع احتمال کانونیکال در نسخه سوم به صورت زیر به‌دست می‌آید [۵]:

$$p_i^{(3)} = \frac{\left[1 - \beta'(1 - q) \left(H - U_q^{(3)}\right)\right]^{\frac{1}{1-q}}}{Q_q^{(3)}}; \left(H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + U_N \right) \quad (4)$$

که در آن:

$$\beta' = \frac{\beta}{\sum_{j=1}^W p_j^q + (1 - q)\beta U_q^{(3)}}; \left(\beta = \frac{1}{kT} \right) \quad (5)$$

$$Q_q^{(3)} = \sum_{i=1}^W \left[1 - \beta'(1 - q) \left(H - U_q^{(3)}\right)\right]^{\frac{1}{1-q}} \quad (6)$$

در معادلات فوق، H هامیلتونی سامانه N ذره‌ای، P_i تکانه (اندازه حرکت) ذره i ام، m جرم ذره، β' پارامتر دمایی شبه‌معکوس، β ضریب لاگرانژ و $Q_q^{(3)}$ تابع تقسیم در نسخه سوم تسالیس است.

فرمول‌بندی تابع توزیع شعاعی در نسخه سوم آمار تسالیس

شکل توانی توزیع احتمال در آمار تسالیس، نسبت به سهم‌های انرژی جنبشی و پتانسیل پیکربندی قابل فاکتورگیری نیست. لذا با انتگرال‌گیری روی متغیرهای فضای فاز، امکان جدایی تکانه‌ها و مختصات وجود ندارد. با توجه به اینکه در $q = 1$ ، آمار تسالیس به آمار بولتزمن-گیبس تبدیل می‌شود، تابع احتمال را حول $q = 1$ بسط تیلور می‌دهیم.

$$\begin{aligned} \left[1 - \beta'(1 - q) \left(H - U_q^{(3)}\right)\right]^{\frac{1}{1-q}} &= e^{-\beta'(H - U_q^{(3)})} + e^{-\beta'(H - U_q^{(3)})} \left[\frac{1}{2} \beta'^2 \left(H - U_q^{(3)}\right)^2 \right] (q - 1) \\ &+ e^{-\beta'(H - U_q^{(3)})} \left[-\frac{1}{3} \beta'^3 \left(H - U_q^{(3)}\right)^3 + \frac{1}{8} \beta'^4 \left(H - U_q^{(3)}\right)^4 \right] (q - 1)^2 + \dots \quad (7) \end{aligned}$$

1- Super-extensive.
2-Sub-extensive.

همان‌طور که مشاهده می‌شود عامل نمایی $e^{-\beta' H}$ در جملات بسط قابل فاکتورگیری است. این شکل معادله نسبت به سهم‌های انرژی جنبشی و پتانسیل جدایی‌پذیر است. در نتیجه، با انتگرال‌گیری هم‌زمان روی همه متغیرها، خواهیم داشت:

$$Q_q^{(3)} = \int \dots \int \left[1 - \beta'(1-q)(H - U_q^{(3)}) \right]^{\frac{1}{1-q}} dP_1 \dots dP_N d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N = Q_0 + Q_1 + Q_2 + \dots \quad (8)$$

که در آن:

$$Q_0 = \int \dots \int e^{-\beta'(H - U_q^{(3)})} dP_1 \dots dP_N d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \quad (9)$$

$$Q_1 = \int \dots \int e^{-\beta'(H - U_q^{(3)})} \left[\frac{1}{2} \beta'^2 (H - U_q^{(3)})^2 \right] (q-1) dP_1 \dots dP_N d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \quad (10)$$

$$Q_2 = \int \dots \int e^{-\beta'H} \left[-\frac{1}{3} \beta'^3 (H - U_q^{(3)})^3 + \frac{1}{8} \beta'^4 (H - U_q^{(3)})^4 \right] (q-1)^2 dP_1 \dots dP_N d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \quad (11)$$

به راحتی می‌توان دریافت که عبارت Q_0 ، مشابه با تابع تقسیم بولتزمن-گیبس است. لذا می‌توان نوشت:

$$Q_0 = \left(\frac{2m\pi}{\beta'} \right)^{\frac{3N}{2}} Z'_N e^{\beta' U_q^{(3)}} ; \left(Z'_N = \int \dots \int e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \right) \quad (12)$$

اکنون به بررسی معادلات (۱۰) و (۱۱) می‌پردازیم. برای Q_1 ، می‌توان نوشت:

$$Q_1 = \int \dots \int e^{-\beta'(H - U_q^{(3)})} \left[\frac{1}{2} \beta'^2 (H - U_q^{(3)})^2 \right] (q-1) dP_1 \dots dP_N d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \\ = e^{\beta' U_q^{(3)}} [Q_{1A} + Q_{1B} + Q_{1C}] (q-1) \quad (13)$$

که در آن:

$$Q_{1A} = \int \dots \int \frac{1}{2} \beta'^2 H^2 e^{-\beta'H} dP_1 \dots dP_N d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \quad (14)$$

$$Q_{1B} = \int \dots \int \frac{1}{2} \beta'^2 (U_q^{(3)})^2 e^{-\beta'H} dP_1 \dots dP_N d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \quad (15)$$

$$Q_{1C} = - \int \dots \int \beta'^2 H U_q^{(3)} e^{-\beta'H} dP_1 \dots dP_N d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \quad (16)$$

عبارت H^2 در معادله (۱۴)، به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$H^2 = \left\{ \sum_{i=1}^N \frac{P_i^2}{2m} + U_N \right\}^2 = \sum_{i=1}^N \frac{P_i^4}{4m^2} + 2 \sum_{i \neq j} \frac{P_i^2 \times P_j^2}{4m^2} + U_N^2 + 2U_N \times \sum_{i=1}^N \frac{P_i^2}{2m} \quad (17)$$

با جای گذاری معادله (۱۷) در Q_{1A} خواهیم داشت:

$$Q_{1A} = \frac{1}{2} \beta'^2 \int \dots \int e^{-\beta' \left(\sum_{i=1}^N \frac{P_i^2}{2m} + U_N \right)} \left\{ \sum_{i=1}^N \frac{P_i^4}{4m^2} + 2 \sum_{i \neq j} \frac{P_i^2 \times P_j^2}{4m^2} + U_N^2 + 2U_N \right. \\ \left. \times \sum_{i=1}^N \frac{P_i^2}{2m} \right\} dP_1 \dots dP_N \, d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \quad (18)$$

$$Q_{1A} = \frac{\beta'^2}{2} \left\{ \frac{N}{4m^2} \times \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta' \frac{P_{i=1}^2}{2m}} P_{i=1}^4 dP_{i=1} \times \left(\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta' \frac{P_{j=2}^2}{2m}} dP_{j=2} \right)^{N-1} \right. \\ \times \int \dots \int e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N + \frac{N(N-1)}{4m^2} \times \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta' \frac{P_{i=1}^2}{2m}} P_{i=1}^2 dP_{i=1} \\ \times \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta' \frac{P_{j=2}^2}{2m}} P_{j=2}^2 dP_{j=2} \times \left(\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta' \frac{P_{k=3}^2}{2m}} dP_{k=3} \right)^{N-2} \\ \times \int \dots \int e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N + \left(\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta' \frac{P_{i=1}^2}{2m}} dP_{i=1} \right)^N \\ \times \int \dots \int U_N^2 e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N + \frac{N}{m} \times \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta' \frac{P_{i=1}^2}{2m}} P_{i=1}^2 dP_{i=1} \\ \times \left(\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta' \frac{P_{j=2}^2}{2m}} dP_{j=2} \right)^{N-1} \times \int \dots \int U_N e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \left. \right\} \\ = \frac{\beta'^2}{2} (Q_{1A_1} + Q_{1A_2} + Q_{1A_3} + Q_{1A_4}) \quad (19)$$

اکنون به ارزیابی جملات معادله (۱۹) می پردازیم. برای حل انتگرال های شامل سهم های تکانه از دستگاه مختصات دکارتی استفاده شده است. برای Q_{1A_1} می توان نوشت:

$$Q_{1A_1} = \frac{N}{4m^2} \left[3 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{\beta' P_y^2}{2m}} dP_y \times \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{\beta' P_z^2}{2m}} dP_z \int_{-\infty}^{+\infty} P_x^4 e^{-\frac{\beta' P_x^2}{2m}} dP_x + \right.$$

$$3 \left(2 \int_{-\infty}^{+\infty} P_x^2 e^{-\frac{\beta' P_x^2}{2m}} dP_x \int_{-\infty}^{+\infty} P_y^2 e^{-\frac{\beta' P_y^2}{2m}} dP_y \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{\beta' P_z^2}{2m}} dP_z \right) \times$$

$$\left[\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{\beta' P_j^2}{2m}} dP_j \right]^{3(N-1)} Z'_N = \frac{15N}{4\beta'^2} \times \left(\frac{2m\pi}{\beta'} \right)^{\frac{3N}{2}} \times Z'_N \quad (20)$$

به‌طور مشابه با Q_{1A_1} ، Q_{1A_2} ، Q_{1A_3} و Q_{1A_4} به ترتیب حاصل می‌شوند:

$$Q_{1A_2} = \frac{9N(N-1)}{4\beta'^2} \left(\frac{2m\pi}{\beta'} \right)^{\frac{3N}{2}} Z'_N \quad (21)$$

$$Q_{1A_3} = \left(\frac{2m\pi}{\beta'} \right)^{\frac{3N}{2}} \times \int \dots \int U_N^2 e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \quad (22)$$

$$Q_{1A_3} = \frac{3N}{\beta'} \left(\frac{2m\pi}{\beta'} \right)^{\frac{3N}{2}} \times \int \dots \int U_N e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \quad (23)$$

با جای‌گذاری معادلات (۲۰)-(۲۳) در Q_{1A} ، عبارت نهایی Q_{1A} به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$Q_{1A} = \left(\frac{2\pi m}{\beta'} \right)^{\frac{3N}{2}} \left\{ \frac{3N(3N+2)}{8} Z'_N + \frac{3N\beta'}{2} \int \dots \int U_N e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \right. \\ \left. + \frac{\beta'^2}{2} \int \dots \int U_N^2 e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \right\} \quad (24)$$

برای Q_{1B} ، در معادله (۱۵)، خواهیم داشت:

$$Q_{1B} = \frac{\beta'^2}{2} \left(\frac{2\pi m}{\beta'} \right)^{\frac{3N}{2}} \left(U_q^{(3)} \right)^2 Z'_N \quad (25)$$

برای Q_{1C} ، در معادله (۱۶)، می‌توان نوشت:

$$Q_{1C} = -\beta'^2 U_q^{(3)} \int \dots \int H e^{-\beta' \left(\sum_{i=1}^N \frac{P_i^2}{2m} + U_N \right)} dP_1 \dots dP_N d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N = -\beta'^2 U_q^{(3)} \times$$

$$\left\{ \frac{N}{2m} \times \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta' \frac{P_{i=1}^2}{2m}} P_{i=1}^2 dP_{i=1} \times \left(\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta' \frac{P_{j=2}^2}{2m}} dP_{j=2} \right)^{N-1} Z'_N + \right.$$

$$\int \dots \int e^{-\beta' \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m}} dP_1 \dots dP_N \int \dots \int U_N e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \left. \vphantom{\int} \right\} = U_q^{(3)} \left(\frac{2\pi m}{\beta'} \right)^{\frac{3N}{2}} \times$$

$$\left[\frac{-3N\beta'}{2} Z'_N - \beta'^2 \int \dots \int U_N e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \right] \quad (26)$$

با توجه به معادلات (۲۴)، (۲۵) و (۲۶)، حاصل Q_1 ، به صورت زیر در خواهد آمد:

$$Q_1 = \left(\frac{2\pi m}{\beta'} \right)^{\frac{3N}{2}} e^{\beta' U_q^{(3)}} \left[\frac{3N(3N+2)}{8} Z'_N + \frac{\beta'^2}{2} \int \dots \int U_N^2 e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \right.$$

$$+ \frac{3N\beta'}{2} \int \dots \int U_N e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N + \frac{\beta'^2}{2} (U_q^{(3)})^2 Z'_N - \frac{3N\beta'}{2} U_q^{(3)} Z'_N$$

$$\left. - \beta'^2 U_q^{(3)} \int \dots \int U_N e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \right] (q-1) \quad (27)$$

به طور مشابه با Q_1 ، حاصل نهایی معادله (۱۱)، به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$Q_2 = \left(\frac{2\pi m}{\beta} \right)^{\frac{3N}{2}} e^{\beta' U_q^{(3)}} \times \left[\frac{N(9N+2)(3N+2)(3N+4) Z'_N}{128} \right.$$

$$+ \frac{9N^2 \beta' (3N+2)}{16} \int \dots \int U_N e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N$$

$$+ \frac{3N \beta'^2 (-2+9N)}{16} \int \dots \int U_N^2 e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N$$

$$+ \frac{\beta'^3 (-4+9N)}{12} \int \dots \int U_N^3 e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N$$

$$+ \frac{\beta'^4}{8} \int \dots \int U_N^4 e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N - \frac{(9N-4)\beta'^3}{12} (U_q^{(3)})^3 Z'_N$$

$$\left. - \frac{9N^2(3N+2)\beta'}{16} U_q^{(3)} Z'_N + \frac{3N(9N-2)\beta'^2}{16} (U_q^{(3)})^2 Z'_N + \frac{\beta'^4}{8} (U_q^{(3)})^4 Z'_N - \right.$$

$$\frac{3N(9N-2)\beta'^2}{8} U_q^{(3)} \int \dots \int U_N e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N$$

$$+ \frac{(9N-4)\beta'^3}{4} (U_q^{(3)})^2 \int \dots \int U_N e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N$$

$$- \frac{(9N-4)\beta'^3}{4} U_q^{(3)} \int \dots \int U_N^2 e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N$$

$$\left. - \frac{\beta'^4}{2} (U_q^{(3)})^3 \int \dots \int U_N e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N - \right.$$

$$\frac{\beta'^4}{2} U_q^{(3)} \int \dots \int U_N^3 e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N + \frac{3\beta'^4}{4} (U_q^{(3)})^2 \int \dots \int U_N^2 e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \Big] \times$$

$$(q-1)^2 \quad (28)$$

با جای‌گذاری معادلات (۱۲)، (۲۷) و (۲۸) در معادله (۸)، عبارت تابع تقسیم در نسخه سوم تسالیس به صورت زیر حاصل می‌شود:

$$Q_q^{(3)} = \left(\frac{2\pi m}{\beta} \right)^{\frac{3N}{2}} e^{\beta' U_q^{(3)}} \left\{ Z'_N \right.$$

$$+ \left[\frac{3N(3N+2)}{8} Z'_N + \frac{\beta'^2}{2} \int \dots \int U_N^2 e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \right.$$

$$+ \frac{3N\beta'}{2} \int \dots \int U_N e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N + \frac{\beta'^2}{2} (U_q^{(3)})^2 Z'_N - \frac{3N\beta'}{2} U_q^{(3)} Z'_N$$

$$\left. - \beta'^2 U_q^{(3)} \int \dots \int U_N e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \right] (q-1) +$$

$$\left[\frac{N(9N+2)(3N+2)(3N+4)}{128} Z'_N + \frac{9N^2 \beta' (3N+2)}{16} \int \dots \int U_N e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N + \right.$$

$$\frac{3N \beta'^2 (-2+9N)}{16} \int \dots \int U_N^2 e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N$$

$$\left. + \frac{\beta'^3 (-4+9N)}{12} \int \dots \int U_N^3 e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N + \right.$$

$$\frac{\beta'^4}{8} \int \dots \int U_N^4 e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N - \frac{(9N-4)\beta'^3}{12} (U_q^{(3)})^3 Z'_N - \frac{9N^2(3N+2)\beta'}{16} U_q^{(3)} Z'_N$$

$$\left. + \frac{3N(9N-2)\beta'^2}{16} (U_q^{(3)})^2 Z'_N + \frac{\beta'^4}{8} (U_q^{(3)})^4 Z'_N - \right.$$

$$\frac{3N(9N-2)\beta'^2}{8} U_q^{(3)} \int \dots \int U_N e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N$$

$$\left. + \frac{(9N-4)\beta'^3}{4} (U_q^{(3)})^2 \int \dots \int U_N e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N - \right.$$

$$\left. \frac{(9N-4)\beta'^3}{4} U_q^{(3)} \int \dots \int U_N^2 e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N - \frac{\beta'^4}{2} (U_q^{(3)})^3 \int \dots \int U_N e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N - \right.$$

$$\left[\frac{\beta'^4}{2} U_q^{(3)} \int \dots \int U_N^3 e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N + \frac{3\beta'^4}{4} (U_q^{(3)})^2 \int \dots \int U_N^2 e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \right] \times (q-1)^2 + \dots \quad (29)$$

با توجه به این که انجام محاسبات برای جملات شامل توان‌های بالاتر بسط، زمان‌بر و دشوار است، به دنبال این هستیم که الگوی منظمی برای تغییرات جملات بسط پیدا کرده و در این زمینه به یک فرم بسته مناسب دست یابیم.

در این مقاله، از یک فرم بسته گزارش شده در مرجع [۵۰]، که برای مشتقات مرتبه m ، $e^{f(x)}$ به کار رفته، استفاده شده است. مشتق مرتبه m ، $e^{f(x)}$ به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\frac{d^m}{dx^m} (e^{f(x)}) = e^{f(x)} \sum_{\{k|k \in \mathbb{N}^\infty, k.s=m\}} \frac{m!}{k! (s!)^k} (f^{(s)})^k \quad (30)$$

که در آن:

$$k = (k_1, k_2, \dots, k_m); \quad s = (1, 2, 3, \dots, m); \quad k! = k_1! \times k_2! \times \dots \times k_m!; \quad (s!)^k = (1!)^{k_1} \times (2!)^{k_2} \times \dots \times (m!)^{k_m}; \quad (f^{(s)})^k = (f')^{k_1} \times (f'')^{k_2} \times \dots \times (f^{(m)})^{k_m}$$

و جمع واقع در معادله (۳۰)، در برگیرنده تمام عناصر k_m, \dots, k_1 است، به گونه‌ای که:

$$k.s = k_1 + 2k_2 + \dots + mk_m = m$$

باید توجه داشت که حالت‌های k ، مانند $k = (1, 1, 1)$ مجاز نمی‌باشند.

برخلاف مکانیک آماری بولتزمن-گیبس، آمار تسالیس دارای یک ماهیت توانی است. اما با استفاده از تعاریف ریاضی غیرمعمول می‌توان آمار تسالیس را در یک شکل نمایی نمایش داد. تابع q -نمایی در نسخه سوم آمار تسالیس به صورت زیر تعریف می‌شود [۵۱]:

$$e_q^{f(x)} = [1 + (1-q)f(x)]^{\frac{1}{1-q}} \quad (31)$$

که در آن:

$$f(x) = \ln \left[1 - (1-q) \beta' \left(H - U_q^{(3)} \right) \right]^{\frac{1}{1-q}} \quad (32)$$

بسط تیلور تابع $e_q^{f(x)}$ حول $q=1$ ، به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$e_q^{f(x)} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \left(\frac{\partial^m e_q^{f(x)}}{\partial q^m} \right)_{q=1} (q-1)^m \quad (33)$$

در حد $q \rightarrow 1$ ، کمیت $\left(\frac{\partial^m e_q^{f(x)}}{\partial q^m} \right)_{q=1}$ می‌تواند با معادله (۳۰) برابر قرار داده شود. بنابراین خواهیم داشت:

$$\left(\frac{\partial^m e_q^{f(x)}}{\partial q^m} \right)_{q=1} = \lim_{q \rightarrow 1} e_q^{f(x)} \sum_{\{k|k \in \mathbb{N}^{\infty}, k.s=m\}} \frac{m!}{k! (s!)^k} \left(\lim_{q \rightarrow 1} f^{(s)}(x) \right)^k \quad (34)$$

چنان‌که:

$$\lim_{q \rightarrow 1} e_q^{f(x)} = e^{-\beta' (H - U_q^{(3)})} \quad (35)$$

$$\lim_{q \rightarrow 1} f^{(s)}(x) = \frac{(s!)}{s+1} \left[-\beta' \left(H - U_q^{(3)} \right) \right]^{s+1} \quad (36)$$

در نتیجه، یک شکل بسته برای معادله (۷)، به صورت زیر حاصل می‌شود:

$$e_q^{-\beta' (H - U_q^{(3)})} = e^{-\beta' (H - U_q^{(3)})} + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m!} e^{-\beta' (H - U_q^{(3)})} \sum_{\{k|k \in \mathbb{N}^{\infty}, k.s=m\}} \frac{m!}{k! (s!)^k} \times \left(\frac{(s!)}{s+1} \left[-\beta' \left(H - U_q^{(3)} \right) \right]^{s+1} \right)^k (q-1)^m \quad (37)$$

با انتگرال‌گیری از معادله (۳۷)، روی تمام تکانه‌ها و مختصات خواهیم داشت:

$$\int \dots \int e_q^{-\beta' (H - U_q^{(3)})} dP_1 \dots dP_N d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N = e^{\beta' U_q^{(3)}} \int \dots \int e^{-\beta' H} dP_1 \dots dP_N d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N + e^{\beta' U_q^{(3)}} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m!} \sum_{\{k|k \in \mathbb{N}^{\infty}, k.s=m\}} \frac{m!}{k! (s!)^k} \left(\frac{(s!)}{s+1} \right)^k (-\beta')^w \int \dots \int e^{-\beta' H} \left(H + (-U_q^{(3)}) \right)^w$$

$$dP_1 \dots dP_N d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \times (q - 1)^m \tag{۳۸}$$

که:

$$w = (s + 1)k \tag{۳۹}$$

با به کار بردن بسط چند جمله‌ای، $[H + (-U_q^{(3)})]^w$ ، می‌توان نوشت:

$$[H + (-U_q^{(3)})]^w = \left(\sum_{i=1}^N \frac{P_i^2}{2m} + U_N + (-U_q^{(3)}) \right)^w = \sum_{x_1 + x_2 + x_3 = w} \frac{w!}{x_1! x_2! x_3!} \times (U_N)^{x_2} (-U_q^{(3)})^{x_3} \tag{۴۰}$$

$$\int \dots \int [H + (-U_q^{(3)})]^w e^{-\beta'H} dP_1 \dots dP_N d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N = \int \dots \int \sum_{x_1 + x_2 + x_3 = w} \frac{w!}{x_1! x_2! x_3!} \times$$

$$\left(\sum_{i=1}^N \frac{P_i^2}{2m} \right)^{x_1} (U_N)^{x_2} (-U_q^{(3)})^{x_3} \times e^{-\beta' \left(\sum_{i=1}^N \frac{P_i^2}{2m} + U_N \right)} dP_1 \dots dP_N d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \tag{۴۱}$$

$$\int \dots \int [H + (-U_q^{(3)})]^w e^{-\beta'H} dP_1 \dots dP_N d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N = \int \dots \int \sum_{x_1 + x_2 + x_3 = w} \frac{w!}{x_1! x_2! x_3!} \times$$

$$\prod_{i=0}^{x_1-1} \frac{3N + 2i}{2^{x_1} (\beta')^{x_1}} \left(\frac{2\pi m}{\beta'} \right)^{\frac{3N}{2}} \times \int \dots \int U_N^{x_2} e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \times (-U_q^{(3)})^{x_3} \tag{۴۲}$$

در نتیجه، یک فرم بسته برای تابع تقسیم در نسخه سوم به صورت زیر پیشنهاد می‌شود:

$$Q_q^{(3)} = \left(\frac{2\pi m}{\beta'} \right)^{\frac{3N}{2}} e^{\beta' U_q^{(3)}} \times \left[Z'_N + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m!} \sum_{\{k|k \in \mathbb{N}^{\infty}, k.s=m\}} \frac{m!}{k! (s!)^k} \left(\frac{(s!)}{s+1} \right)^k \right. \\ \left. \times (-\beta')^w (q - 1)^m \sum_{x_1 + x_2 + x_3 = w} \frac{w!}{x_1! x_2! x_3!} \prod_{i=0}^{x_1-1} \frac{3N + 2i}{2^{x_1} (\beta')^{x_1}} \int \dots \int U_N^{x_2} e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \right]$$

$$\times (-U_q^{(3)})^{x_3} \quad (43)$$

تابع چگالی سامانه N - ذره‌ای تعادلی در مکانیک آماری تسالیس دارای شکل زیر است:

$$\rho^{(n)}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n) = \frac{N!}{(N-n)!} \times \frac{\int \dots \int e_q^{-\beta'(U_N - U_q^{(3)})} d\mathbf{r}_{n+1} \dots d\mathbf{r}_N}{Z_N^{TS}} \quad (44)$$

که در آن:

$$\begin{aligned} & \int \dots \int e_q^{-\beta'(U_N - U_q^{(3)})} d\mathbf{r}_{n+1} \dots d\mathbf{r}_N \\ &= \left[\int \dots \int e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_{n+1} \dots d\mathbf{r}_N + \left[\frac{3N(3N+2)}{8} \int \dots \int e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_{n+1} \dots d\mathbf{r}_N + \right. \right. \\ &+ \frac{\beta'^2}{2} \int \dots \int U_N^2 e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_{n+1} \dots d\mathbf{r}_N \\ &+ \frac{3N\beta'}{2} \int \dots \int U_N e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_{n+1} \dots d\mathbf{r}_N + \frac{\beta'^2}{2} (U_q^{(3)})^2 \int \dots \int e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_{n+1} \dots d\mathbf{r}_N \\ &\left. - \frac{3N\beta'}{2} U_q^{(3)} \int \dots \int e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_{n+1} \dots d\mathbf{r}_N - \beta'^2 U_q^{(3)} \int \dots \int U_N e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_{n+1} \dots d\mathbf{r}_N \right] \\ &\times (q-1) + \dots \quad (45) \end{aligned}$$

و انتگرال پیکربندی توزیع تسالیس به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\begin{aligned} Z_N^{TS} &= \left[Z'_N + \left[\frac{3N(3N+2)}{8} Z'_N + \frac{\beta'^2}{2} \int \dots \int U_N^2 e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \right. \right. \\ &\left. + \frac{3N\beta'}{2} \int \dots \int U_N e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N + \frac{\beta'^2}{2} (U_q^{(3)})^2 Z'_N - \frac{3N\beta'}{2} U_q^{(3)} Z'_N - \right. \\ &\left. \left. \beta'^2 U_q^{(3)} \int \dots \int U_N e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \right] (q-1) + \dots \right] \quad (46) \end{aligned}$$

توزیع توانی در نسخه سوم آمار تسالیس، نسبت به سهم‌های انرژی جنبشی و پتانسیل پیکربندی تفکیک‌پذیر است. بنابراین تابع توزیع چگالی N - ذره‌ای تعادلی، مستقل از تکانه است. مورد اخیر در توافق با سایر نسخه‌های تسالیس است [۴۹].

در نهایت، با توجه به فرمول‌بندی ارائه شده در این بخش، تابع توزیع شعاعی سامانه N -ذره‌ای تعادلی در نسخه سوم مکانیک آماری تسالیس، دارای فرم بسته زیر است:

$$g^{(n)}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n) = \frac{V^n}{N^n} \times \frac{N!}{(N-n)!} \times \frac{A}{B} \quad (47)$$

که در آن:

$$A = \int \dots \int e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_{n+1} \dots d\mathbf{r}_N + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m!} \sum_{\{k|k \in \mathbb{N}^{\infty}, k.s=m\}} \frac{m!}{k! (s!)^k} \left(\frac{(s!)}{s+1} \right)^k (-\beta')^w \times$$

$$\sum_{x_1+x_2+x_3=w} \frac{w!}{x_1! x_2! x_3!} \prod_{i=0}^{x_1-1} \frac{3N+2i}{2^{x_1} \beta'^{x_1}} \int \dots \int U_N^{x_2} e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_{n+1} \dots d\mathbf{r}_N (-U_q^{(3)})^{x_3} \times (q - 1)^m$$

و

$$B = Z'_N + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m!} \sum_{\{k|k \in \mathbb{N}^{\infty}, k.s=m\}} \frac{m!}{k! (s!)^k} \left(\frac{(s!)}{s+1} \right)^k (-\beta')^w \times$$

$$\sum_{x_1+x_2+x_3=w} \frac{w!}{x_1! x_2! x_3!} \prod_{i=0}^{x_1-1} \frac{3N+2i}{2^{x_1} \beta'^{x_1}} \int \dots \int U_N^{x_2} e^{-\beta' U_N} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N (-U_q^{(3)})^{x_3} \times (q - 1)^m$$

نتایج عددی در چگالی‌های پایین

در حد چگالی‌های نزدیک صفر، $g(r)$ در نسخه سوم آمار تسالیس دارای شکل بسته به صورت زیر می‌باشد:

$$g_{T_s}^{(2)}(r_{12}) = \left(1 - \frac{1}{N}\right) \times \left[\frac{V^2 e^{-\beta' U(r_{12})} \times (1+C)}{\iint e^{-\beta' U(r_{12})} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 + D} \right] \quad (48)$$

که در آن:

$$C = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m!} \sum_{\{k|k \in \mathbb{N}^{\infty}, k.s=m\}} \frac{m!}{k! (s!)^k} \left(\frac{(s!)}{s+1} \right)^k (-\beta')^w \times \sum_{x_1+x_2+x_3=w} \frac{w!}{x_1! x_2! x_3!} \times$$

$$\prod_{i=0}^{x_1-1} \frac{3N+2i}{2^{x_1} \beta'^{x_1}} (U(r_{12}))^{x_2} (-U_q^{(3)})^{x_3} \times (q-1)^m$$

9

$$D = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m!} \sum_{\{k|k \in \mathbb{N}^{\infty}, k.s=m\}} \frac{m!}{k! (s!)^k} \left(\frac{(s!)}{s+1} \right)^k (-\beta')^w \times \sum_{x_1+x_2+x_3=w} \frac{w!}{x_1! x_2! x_3!} \times$$

$$\prod_{i=0}^{x_1-1} \frac{3N+2i}{2^{x_1} \beta'^{x_1}} \iint (U(r_{12}))^{x_2} e^{-\beta' U(r_{12})} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 (-U_q^{(3)})^{x_3} \times (q-1)^m$$

مقدار β' در معادله (۴۸) از طریق معادله زیر بیان می‌شود [۵۲]:

$$\beta' = \frac{1}{kT \left(Q_q^{(3)} \right)^{1-q} + (1-q)U_q^{(3)}} \quad (۴۹)$$

همچنین $U_q^{(3)}$ به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$U_q^{(3)} = \frac{\int \dots \int H \left[1 - (1-q)\beta'(H - U_q^{(3)}) \right]^{\frac{q}{1-q}} dP_1 dP_2 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2}{\int \dots \int \left[1 - (1-q)\beta'(H - U_q^{(3)}) \right]^{\frac{q}{1-q}} dP_1 dP_2 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2} \quad (۵۰)$$

با توجه به این که در حد چگالی‌های نزدیک صفر، عملاً سهم برهم‌کنش بین ذرات ناچیز است، می‌توان از مدل گاز ایده‌آل کلاسیکی به عنوان یک تقریب مناسب برای ساده‌سازی معادله (۵۰) استفاده کرد. بنابراین معادله (۵۰) می‌تواند به شکل زیر بیان شود:

$$U_q^{(3)} = \frac{\int_0^{v_{max}} \int_0^{v_{max}} \left[\frac{P_1^2}{2m} + \frac{P_2^2}{2m} \right] \left[1 - (1-q)\beta' \left(\frac{P_1^2}{2m} + \frac{P_2^2}{2m} - U_q^{(3)} \right) \right]^{\frac{q}{1-q}} dP_1 dP_2}{\int_0^{v_{max}} \int_0^{v_{max}} \left[1 - (1-q)\beta' \left(\frac{P_1^2}{2m} + \frac{P_2^2}{2m} - U_q^{(3)} \right) \right]^{\frac{q}{1-q}} dP_1 dP_2} \quad (۵۱)$$

معادله (۵۱)، به ازای مقادیر $q < 1$ ، دارای شرط قطع^۱ است. لذا کران بالای انتگرال U_{max} ، به صورت زیر تعریف می شود [۵۳]:

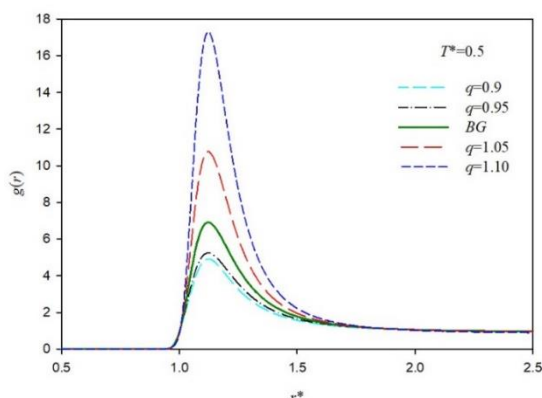
$$\left\{ \begin{array}{l} v_{max} = \sqrt{\frac{2m}{N\beta'(q-1)}} \\ v_{max} = \infty \end{array} \right. \quad \left. \begin{array}{l} q < 1 \\ q > 1 \end{array} \right\} \quad (52)$$

مقدار انرژی درونی در نسخه سوم $U_q^{(3)}$ ، به طور خودسازگار از حل همزمان معادلات (۴۹) و (۵۱) به دست می آید. کمیت‌های به کار رفته در معادله (۴۸)، برحسب پارامترهای ε و σ پتانسیل لنارد-جونز (که ε عمق چاه پتانسیل و σ قطر مولکول است)، به شکل کاهش یافته هستند. T^* دمای کاهش یافته، r^* فاصله‌ی بین مولکولی کاهش یافته و ρ^* چگالی کاهش یافته، به ترتیب به صورت زیر تعریف می شوند:

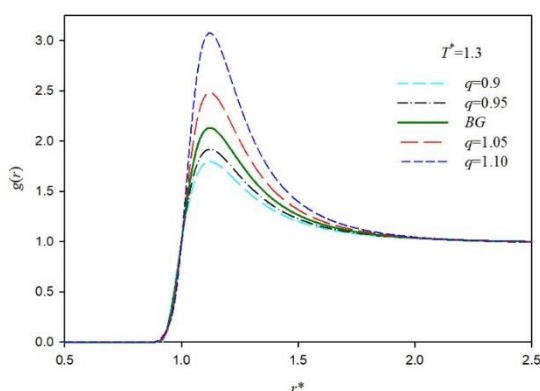
$$T^* = k_B T / \varepsilon \quad : \quad r^* = r / \sigma \quad : \quad \rho^* = \rho \sigma^3, \quad \rho = N/V \quad (53)$$

در حل عددی معادله (۴۸)، محاسبات را تا جمله پنجم در نظر گرفتیم. این بسط برای همه‌ی مقادیر q مجاز است. برای مقادیر بزرگتر $|q - 1|$ ، به مرتبه‌های بالاتر بسط سری فوق نیاز است. به منظور بررسی تأثیر شاخص انتروپی q ، بر RDF سیال لنارد-جونز، تابع همبستگی جفت $g(r)$ ، برحسب r^* ، (در نسخه سوم آمار تسالیس) برای q های ۰/۹، ۰/۹۵، ۱، ۱/۰۵ و ۱/۱۰، در دماهای کاهش یافته ۰/۵ و ۱،۳، تحت چگالی‌های پایین رسم شده است (شکل‌های (۱-الف) و (۱-ب)). همان‌طور که مشاهده می شود ارتفاع قله‌ها با افزایش مقادیر q افزایش می یابد. از سوی دیگر، افزایش ارتفاع قله‌ها نشان‌دهنده افزایش مقدار همبستگی است. در دما و چگالی یکسان، با افزایش همبستگی، مقدار انتروپی کاهش پیدا می کند. بنابراین می توان دریافت که در حالت فوق مقداری، مقدار انتروپی سامانه بزرگ‌تر از مقدار انتروپی بولتزمن-گیبس است، همچنین در حالت زیر مقداری، مقدار انتروپی سامانه کوچک‌تر از انتروپی بولتزمن-گیبس است. مطابق با شکل (۱-الف)، زمانی که $q = 0/9$ است، مقادیر غیرصفر $g(r)$ از $r^* \approx 0/95$ شروع می شوند. با افزایش مقادیر q ، مقادیر غیرصفر از مقادیر بزرگ‌تر r^* شروع می شوند. این رفتار مشابه با اثر جاذبه، ε ، بر $g(r)$ است. بنابراین، افزایش مقدار q و افزایش اثر ε ، تأثیرات مشابهی دارند. نتایج فوق، در توافق با سایر نسخه‌های آمار تسالیس در چگالی‌های نزدیک صفر است [۴۹]. جنبه‌های کیفی نتایج در نسخه‌های مختلف آمار تسالیس یکسان است. در نسخه سوم آمار تسالیس، با پارامتر β' روبرو هستیم که به β وابسته است. بنابراین، نتایج در نسخه‌های مختلف، از نظر کمی متفاوت هستند.

¹ Cut-off.



(الف)



(ب)

شکل ۱. تابع همبستگی جفت $g(r)$ ، برحسب r/σ (در نسخه سوم تسالیس)، برای q های مختلف (الف) در دمای کاهش یافته $0/5$ (ب) در دمای کاهش یافته $1/3$ ، در چگالی‌های پایین.

نتیجه‌گیری

در چارچوب مکانیک آماری تسالیس، یک معادله جدید برای تابع توزیع شعاعی (RDF)، در نسخه سوم این آمار به دست آمده است. همچنین یک فرمول بسته برای RDF، در این نسخه پیشنهاد شده است. در مقایسه با مکانیک آماری بولتزمن-گیس، تابع توزیع شعاعی در آمار تسالیس از شکل پیچیده‌تری برخوردار است. تأثیر شاخص انتروپی q ، بر RDF یک سیال لنارد-جونز مورد مطالعه قرار گرفته است. محاسبات عددی برای RDF در نسخه سوم، تحت چگالی‌های نزدیک صفر انجام گرفته است. در چگالی و دمای ثابت، بیشینه $g(r)$ با افزایش مقادیر q ، افزایش می‌یابد. افزایش مقادیر q و افزایش اثرات جاذبه تأثیر مشابهی دارند. نمی‌توان با تکیه بر نتایج RDF در چگالی‌های پایین، ادعا کرد که این تشابه برای همه سامانه‌های با برهم‌کنش‌های متفاوت عمومیت دارد. نتایج عددی در دما و چگالی ثابت،

حاکی از آن است که با افزایش مقادیر q ، همبستگی افزایش پیدا می‌کند. با افزایش همبستگی، مقدار انتروپی کاهش می‌یابد. نتیجهٔ اخیر در توافق با دانسته‌های قبلی ما در مورد انتروپی تسالیس است. در این خصوص می‌توان رابطهٔ زیر را نوشت:

$$S_q^{sup-ex} > S_{q=1}^{BG} > S_q^{sub-ex} \quad (۵۴)$$

روند کیفی نتایج در نسخه‌های مختلف یکسان است. با توجه به این که در نسخهٔ سوم تسالیس با پارامتر β' که یک پارامتر شبه‌معکوس دمایی نامیده می‌شود، روبه‌رو هستیم، طبیعی است که نتایج به لحاظ کمی در نسخه‌های متفاوت متمایز باشند.

منابع

1. C. Tsallis, "Introduction to nonextensive statistical mechanics", Springer, (2009).
2. S. Abe, Y. Okamoto, "Nonextensive statistical mechanics and its applications", Springer-Verlag, Heidelberg, (2001).
3. C. Tsallis, "Nonextensive statistics: theoretical, experimental and computational evidences and connections", Brazilian Journal of Physics, 29 (1999) 1-35.
4. C. Tsallis, "Nonadditive entropy and nonextensive statistical mechanics-An overview after 20 years", Brazilian Journal of Physics, 39 (2009) 337-356.
5. C. Tsallis, R. Mendes, A.R. Plastino, "The role of constraints within generalized nonextensive statistics", Physica A, 261 (1998) 534-554.
6. Y. Sota, O. Iguchi, M. Morikawa, T. Tatakawa, K.-i. Maeda, "Origin of scaling structure and non-Gaussian velocity distribution in a self-gravitating ring model", Physical Review E, 64 (2001) 056133.
7. N. Komatsu, T. Kiwata, S. Kimura, "Transition of velocity distributions in collapsing self-gravitating N-body systems", Physical Review E, 85 (2012) 021132.
8. H.P. de Oliveira, S.L. Sautu, I.D. Soares, E.V. Tonini, "Chaos and universality in the dynamics of inflationary cosmologies", Physical Review D, 60 (1999) 121301.

9. H.P. de Oliveira, I.D. Soares, E.V. Tonini, "Universality in the chaotic dynamics associated with saddle-centers critical points", *Physica A*, 295 (2001) 348-358.
10. D.B. Walton, J. Rafelski, "Equilibrium Distribution of Heavy Quarks in Fokker-Planck Dynamics", *Physical Review Letters*, 84 (2000) 31-34.
11. C. Tsallis, J.C. Anjos, E.P. Borges, "Fluxes of cosmic rays: a delicately balanced stationary state", *Physics Letters A*, 310 (2003) 372-376.
12. D.O. Kharchenko, V.O. Kharchenko, "Evolution of a stochastic system within the framework of Tsallis statistics", *Physica A*, 354 (2005) 262-280.
13. A. Kononovicius, J. Ruseckas, "Stochastic dynamics of N correlated binary variables and non-extensive statistical mechanics", *Physics Letters A*, 380 (2016) 1582-1588.
14. L.F. Burlaga, A.F. Viñas, "Triangle for the entropic index q of non-extensive statistical mechanics observed by Voyager 1 in the distant heliosphere", *Physica A*, 356 (2005) 375-384.
15. L.F. Burlaga, A.F. Vinas, "Tsallis Distribution Functions in the Solar Wind: Magnetic Field and Velocity Observations", in: *AIP Conference Proceedings*, 965 (2007), pp. 259-266.
16. K.E. Daniels, C. Beck, E. Bodenschatz, "Defect turbulence and generalized statistical mechanics", *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 193 (2004) 208-217.
17. P. Douglas, S. Bergamini, F. Renzoni, "Tunable Tsallis Distributions in Dissipative Optical Lattices", *Physical Review Letters*, 96 (2006) 110601.
18. G.B. Bagci, T. Oikonomou, "Tsallis power laws and finite baths with negative heat capacity", *Physical Review E*, 88 (2013) 042126.
19. B. Einarsson, "Conditions for negative specific heat in systems of attracting classical particles", *Physics Letters A*, 332 (2004) 335-344.
20. J. Maddox, "When entropy does not seem extensive", *Nature*, 365 (1993) 103-103.
21. D. O'Malley, V.V. Vesselinov, J.H. Cushman, "Diffusive mixing and Tsallis entropy", *Physical Review E*, 91 (2015) 042143.

22. L. Marques, J. Cleymans, A. Deppman, "Description of high-energy pp collisions using Tsallis thermodynamics: Transverse momentum and rapidity distributions", *Physical Review D*, 91 (2015) 054025.
23. B.-C. Li, Y.-Z. Wang, F.-H. Liu, X.-J. Wen, Y.-E. Dong, "Particle production in relativistic $pp(p^-)$ and AA collisions at RHIC and LHC energies with Tsallis statistics using the two-cylindrical multisource thermal model", *Physical Review D*, 89 (2014) 054014.
24. S. Abe, "A note on the q -deformation-theoretic aspect of the generalized entropies in nonextensive physics", *Physics Letters A*, 224 (1997) 326-330.
25. A. Rényi, "On measures of entropy and information", HUNGARIAN ACADEMY OF SCIENCES Budapest Hungary (1961).
26. S. Abe, "Axioms and uniqueness theorem for Tsallis entropy", *Physics Letters A*, 271 (2000) 74-79.
27. G. Kaniadakis, "Non-linear kinetics underlying generalized statistics", *Physica A*, 296 (2001) 405-425.
28. E.M. Curado, F.D. Nobre, "On the stability of analytic entropic forms", *Physica A*, 335 (2004) 94-106.
29. E.M. Curado, "General aspects of the thermodynamical formalism", *Brazilian Journal of Physics*, 29 (1999) 36-45.
30. C. Tsallis, "Possible generalization of Boltzmann-Gibbs statistics", *Journal of statistical physics*, 52 (1988) 479-487.
31. H. Hasegawa, "Specific heat and entropy of N -body nonextensive systems", *Physical Review E*, 82 (2010) 031138.
32. E. K. Lenzi, R.S. Mendes, L.R. da Silva, L.C. Malacarne, "Remarks on $(1-q)$ expansion and factorization approximation in the Tsallis nonextensive statistical mechanics", *Physics Letters A*, 289 (2001) 44-50.

33. S. Abe, "Thermodynamic limit of a classical gas in nonextensive statistical mechanics: Negative specific heat and polytropism", *Physics Letters A*, 263 (1999) 424-429.
34. S. Abe, "Correlation induced by Tsallis' nonextensivity", *Physica A*, 269 (1999) 403-409.
35. C. Tsallis, A.R. Plastino, W.M. Zheng, "Power-law sensitivity to initial conditions—New entropic representation", *Chaos, Solitons & Fractals*, 8 (1997) 885-891.
36. U. Tirnakli, C. Beck, C. Tsallis, "Central limit behavior of deterministic dynamical systems", *Physical Review E*, 75 (2007) 040106.
37. B.M. Boghosian, "Thermodynamic description of the relaxation of two-dimensional turbulence using Tsallis statistics", *Physical Review E*, 53 (1996) 4754-4763.
38. U. Tirnakli, D.F. Torres, "Exact and approximate results of non-extensive quantum statistics", *Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems*, 14 (2000) 691-698.
39. H.H. Aragão-Rêgo, D.J. Soares, L.S. Lucena, L.R. da Silva, E.K. Lenzi, K. Sau Fa, "Bose–Einstein and Fermi–Dirac distributions in nonextensive Tsallis statistics: an exact study", *Physica A*, 317 (2003) 199-208.
40. F.D. Nobre, C. Tsallis, "Infinite-range Ising ferromagnet: Thermodynamic limit within Generalized Statistical Mechanics", *Physica A*, 213 (1995) 337-356.
41. D. A. McQuarrie, "Statistical Mechanics", Harper and Row, New York, (1976).
42. H. Gould, J. Tobochnik, "Statistical and thermal physics: with computer applications", Princeton University Press, (2010).
43. J.-P. Hansen, I.R. McDonald, "Theory of Simple Liquids: With Applications to Soft Matter", Academic Press, (2013).
44. G.J. Throop, R.J. Bearman, "The pair correlation function and thermodynamic properties for the Lennard-Jones 6–12 potential and the Percus-Yevick equation", *Physica*, 32 (1966) 1298-1318.

45. F. Mandel, R.J. Bearman, M.Y. Bearman, "Numerical Solutions of the Percus–Yevick Equation for the Lennard-Jones (6–12) and Hard-Sphere Potentials", *Journal of Chemical Physics*, 52 (1970) 3315-3323.
46. A. Ben-Naim, V.K. Shen, "Pair correlation functions of simple solutes in a Lennard-Jones solvent", *Journal of Chemical Physics*, 129 (2008) 194514.
47. T. Miyata, S. Miyazaki, "Accuracy of temperature-derivative of radial distribution function calculated under approximations in Ornstein-Zernike theory for one-component Lennard-Jones fluid", *Chemical Physics Letters*, 658 (2016) 224-229.
48. T. Miyata, Y. Ebato, "Thermodynamic significance to correct the location of first rising region in radial distribution function approximately estimated from Ornstein–Zernike integral equation theory for Lennard–Jones fluids", *Journal of Molecular Liquids*, 217 (2016) 75-82.
49. S.M.A.T. Bafghi, M. Kamalvand, A. Morsali, M.R. Bozorgmehr, "Radial distribution function within the framework of the Tsallis statistical mechanics", *Physica A*, 506 (2018) 857-867.
50. K. Drakakis, "On a Closed Formula for the Derivatives of $e^{f(x)}$ and Related Financial Applications", *International Mathematical Forum* (2009), pp. 401-407.
51. C. Tsallis, "What are the numbers that experiments provide", *Quim. Nova*, 17 (1994) 468-471.
52. G.L. Ferri, S. Martínez, A. Plastino, "Equivalence of the four versions of Tsallis's statistics", *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2005 (2005) P04.
53. E. keshavarzi, A. Helmi, M. Kamalvand, "How the Nonextensivity Parameter Affects Energy Fluctuations", *Physical Chemistry Research*, 2 (2014) 137-145.