通过变分方法计算强耦合单组分等离子体的超额能量

S. A. Khrapak 和 A. G. Khrapak*Joint Institute for High Temperatures, Russian Academy of Sciences, 125412 Moscow, Russia*(日期：2026年1月6日)

采用变分方法，并结合硬球流体超额熵的不同形式（将其用作参考系），计算了单组分等离子体流体的超额能量。通过将计算结果与近期单组分等离子体超额能量的蒙特卡罗结果进行比较，我们发现，Percus-Yevick维里熵最适合用于此类变分计算。文中简要讨论了其中的原因以及本研究分析的潜在发展方向。我们还表明，单组分等离子体流体热分量超额能量的原始Rosenfeld-Tarazona标度关系与近期蒙特卡罗结果高度吻合。

arXiv:2601.01659v1 [physics.plasm-ph] 4 Jan 2026

I. 引言

为了估算多体系统的性质，可以将其与另一个性质已知且更为准确的参考系联系起来。尤其是，Bogoliubov变分不等式被广泛用于此目的 [1]。它是统计物理学中的一项基本结论，为多体系统的亥姆霍兹自由能给出了上限：

$$F \leq F_0 + \langle H - H_0 \rangle_0, \tag{1}$$

其中， F 和 F_0 分别为实际系统和参考系的亥姆霍兹自由能，而 H 和 H_0 则分别为它们在参考系给定状态下的哈密顿量。对于由对势相互作用的粒子组成的经典系统，两个哈密顿量的差异仅在于参考系给定状态下的势能（超额能）。借助积分能量方程 [1]，可以通过参考系的径向分布函数（RDF）$g_0(r)$来表示这一点。特别值得考虑的是采用硬球（HS）组合作为参考系，因为其势能恒为零；系统的性质（如 $g_0(r)$）已相当明确，且仅取决于一个参数——堆积分数$\eta = \pi n \sigma^3/6$，其中 n 为球体的数密度， σ 为其直径。采用这一选择后，我们可以将 Bogoliubov 不等式改写为

$$F \leq -TS_0(\eta) + \frac{N}{2} n \int g_0(r;\eta)\phi(r) d\mathbf{r}, \tag{2}$$

其中， T 是温度， S_0 是硬球系统的熵（与适当的状态方程相关）， N 是粒子数，而 $\phi(r)$是所研究系统的相互作用势。方程（2）的右端（RHS）取决于堆积分数 η，后者充当变分参数。对 η 求导以使右端最小，可得到所研究系统自由能的最佳估计。这就是实际中如何利用硬球参考系进行变分计算。

自然可以预期，对于相互作用较陡的系统，例如 Lennard-Jones 系统 [2, 3] 或指数足够大的反幂势 [4, 5]，硬球参考系会更为适用。令人惊讶的是，即使对于极其柔软且长程的类库仑相互作用，它仍然是一种有用的现象学模型，尽管并非所有实现方式都能达到令人满意的精度 [6]。实际上，事实证明，这一方法对硬球熵的具体形式相当敏感。决定变分计算精度的并非$S_0(\eta)$ 项本身的准确性，而是它与用于计算超额能量的径向分布函数 $g_0(r;\eta)$ 是否一致。

本文研究强耦合单组分等离子体（OCP）。它是一种经典流体，其中带电粒子通过库仑相互作用势相互作用，并浸没在均匀的反向电荷背景中，以确保准电中性 [7, 8]。我们采用硬球流体作为参考系，通过变分方法并使用硬球流体的五种不同状态方程，计算超额内能。由此，我们量化不同近似对这一重要特例中 $S_0(\eta)$的准确度。值得注意的是，我们的比较基于近期报道的硬球流体热力学性质的分子动力学（MD）模拟结果 [9] ，以及采用角平均 Ewald 势（AAEP）的单组分等离子体流体蒙特卡罗（MC）模拟结果 [10, 11]。这些结果的精度似乎已足以满足大多数实际应用的需求，因此，系统评估硬球熵的不同假设所造成的影响，既切合实际，也正逢其时。此外，我们借此机会更新 Rosenfeld-Tarazona 标度在单组分等离子体流体中的适用性。

II. 计算

单组分等离子体由一个无量纲库仑耦合参数 $\Gamma = q^2/aT$ 表征，其中 q 是电荷， $a = (4\pi n/3)^{-1/3}$ 是维格纳-赛茨半径。在 $\Gamma \ll 1$ 时，系统处于弱耦合区，单组分等离子体呈现类气体行为。在 $\Gamma \gtrsim 1$时，强耦合开始起作用，单组分等离子体呈现类流体行为。事实上，近期已确定气体样到液体样动力学行为交叉转变的中心位于

于 $\Gamma \sim 10$ [12–14]。在 $\Gamma \gtrsim 50$ 时，振动主导单组分等离子体的动力学行为和输运性质 [15, 16]。流体-固体相变发生于 $\Gamma \simeq 174$，此时流体相和固体相的亥姆霍兹自由能曲线相交，单组分等离子体结晶为体心立方晶格 [8, 17, 18]。文献中也从不同角度讨论了在更高 Γ 下发生玻璃化转变的可能性 [19–23]。本文主要关注强耦合流体区域。

略去理想气体项后，我们用惯常的约化超额单位重写式（2） [7]

$$f_{\rm ex} \le -s_{\rm ex}(\eta) + u_{\rm ex}(\Gamma,\eta). \tag{3}$$

超额能量的计算应根据单组分等离子体的特定性质进行调整。考虑到中和背景的存在、库仑相互作用势 $\phi(r) = q^2/r$，并引入约化距离 $x = r/\sigma$，超额能量项变为

$$u_{\rm ex}(\Gamma,\eta) = 6\Gamma\eta^{2/3}\int_0^\infty [g_0(x;\eta)-1]\,x dx. \tag{4}$$

注意到以下关系即可计算该积分：

$$\begin{aligned}&\int_0^\infty [g_0(x;\eta)-1]\,x dx = \\ &= \lim_{t\to 0}\int_0^\infty e^{-tx}\,[g_0(x;\eta)-1]\,x dx = \lim_{t\to 0}\left[G(t,\eta) - \frac{1}{t^2}\right].\end{aligned} \tag{5}$$

在 Percus–Yevick（PY）理论中，函数 $G(t,\ \eta)$ 有解析表达式 [24]。计算该极限是一个有趣的练习，结果为

$$u_{\rm ex}(\Gamma,\eta) = -3\Gamma\eta^{2/3}\frac{1-\frac{1}{5}\eta+\frac{1}{10}\eta^2}{1+2\eta}. \tag{6}$$

这一结果由 Jones 推导得出 [25], ，不过原始版本中有一处印刷错误 [26]。

超额熵与压缩因子 $Z = P/nT$ 之间满足一个积分方程（我们以能量单位表示温度，因此 Z 是无量纲量）

$$s_{\rm ex}(\eta) = -\int_0^\eta \frac{Z(\eta')-1}{\eta'}d\eta'. \tag{7}$$

下面，我们将检验硬球流体的五种不同状态方程（EoS）。前两种是传统的 Percus–Yevick 结果 [24,27], 分别通过维里 （压力）路线获得

$$Z_{\rm v}(\eta) = \frac{1+2\eta+3\eta^2}{(1-\eta)^2}, \tag{8}$$

或通过可压缩性 途径

$$Z_{\rm c}(\eta) = \frac{1+\eta+\eta^2}{(1-\eta)^3}. \tag{9}$$

这种差异源于与 PY 理论的近似性质相关的热力学不一致性。更精确的*Carnahan-Starling* 状态方程 [28]可视为 $Z_{\rm v}$ 和 $Z_{\rm c}$ 的线性叠加，

$$Z_{\rm CS}(\eta) = \frac{1+\eta+\eta^2-\eta^3}{(1-\eta)^3}. \tag{10}$$

第四种状态方程是较新的结果，它将 Percus–Yevick 理论与化学势 路线相结合 [29]

$$Z_\mu = -9\frac{\ln(1-\eta)}{\eta} - 8\frac{1-\frac{31}{16}\eta}{(1-\eta)^2}. \tag{11}$$

第五种是半经验的修正 *Kolafa*、*Labik*和*Malijevsky*（mKLM）状态方程，其函数形式基于文献 [30] 中提出的形式，并根据新的分子动力学模拟结果 [9] 进行了修正。该状态方程具有如下解析形式

$$Z_{\rm mKLM}(\eta) = 1 + \sum_{j=1}^{8} B_i x^j + B_{10}x^{10} + B_{14}x^{14} + B_{22}x^{22}, \tag{12}$$

其中 $x = \eta/(1-\eta)$，系数为 $B_1 = 4$、 B_2 =6、 $B_3 = 2.364768$、 $B_4 = -0.8698551$、 $B_5 = 1.1062803$、$B_6 = -1.1014221$、 $B_7 = 0.66605866$、 $B_8 = -0.03633431$、$B_{10} = -0.20965164$、 $B_{14} = 0.10555569$ 和 $B_{22} = -0.00872380$。它能够在最高达到 $\eta \simeq 0.534$ [9] 的范围内，对硬球流体（稳定态和亚稳态）的热力学性质作出极佳的描述。

我们不推导与 $s_{\rm ex}$相应的表达式，因为变分计算中并不需要这些表达式。由于我们需要最小化式（3）的右端，因此超额能量和熵对 η 的导数最为重要。我们得到

$$\frac{\partial u_{\rm ex}}{\partial \eta} = -\Gamma\frac{(1-\eta)^2(2+\eta)}{\eta^{1/3}(1+2\eta)^2} \tag{13}$$

and

$$\frac{\partial s_{\rm ex}}{\partial \eta} = -\frac{Z(\eta)-1}{\eta}. \tag{14}$$

令式（3）右端的导数为零，我们得到 Γ 与 η之间的一个简单关系

$$\Gamma = \frac{[Z(\eta)-1]\,(1+2\eta)^2}{\eta^{2/3}(1-\eta)^2(2+\eta)}. \tag{15}$$

该关系显然取决于计算中所选用的硬球状态方程的具体形式。随后即可根据式（6）轻松得到超额能量关于 Γ的函数。这使我们能够以简单的参数形式便捷地研究单组分等离子体流体的热力学性质。

III. 结果

在所考虑的五种硬球状态方程中，可以预期 mKLM 状态方程是目前可用的

表 I. 硬球流体在冻结点 $\eta = 0.4918$ [9]处的压缩因子 Z、约化超额熵$s_{\rm ex}$和约化声速 $c_s/v_{\rm T}$ （其中 $v_{\rm T}$ 为热速度）。计算采用五种状态方程模型：通过维里途径得到的 PY（PY-v）、通过压缩性途径得到的 PY（PY-c）、通过化学势途径得到的 PY（PY-μ）、Carnahan–Starling 状态方程（CS）以及修正的 Kolafa、Labik 和 Malijevsky 状态方程（mKLM）。

	PY-v	PY-c	PY-μ	CS	mKLM
Z	10.49	13.21	10.92	12.30	12.31
$s_{\rm ex}$	-4.45	-4.98	-4.55	-4.81	-4.82
$c_{\rm s}/v_{\rm T}$	10.66	13.23	11.07	12.39	12.40

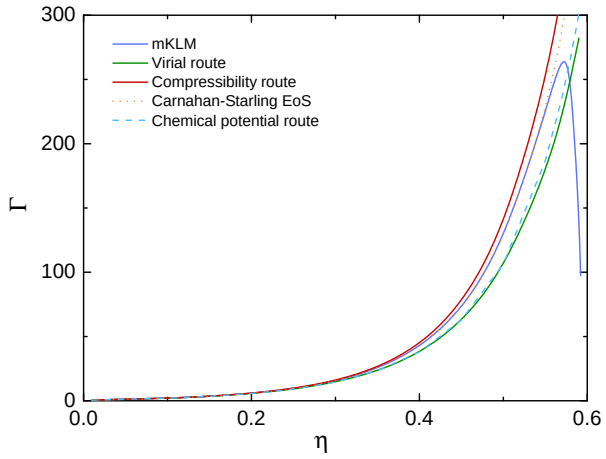

图 1.（在线彩色）根据式 (15)，采用不同硬球流体压缩率计算的 Γ 对 η 的依赖关系，详见图例。

方法中最准确的，正如文献 [9]的图 1 所示。所有状态方程在低数密度区域（ η较小）都相对准确，因为前两个维里系数是精确的。随着 η 增大，偏差变得明显。为展示这些偏差的程度，我们计算了固化时对应堆积分数下硬球流体的若干重要性质。我们选取了三个性质：压缩因子本身、超额熵和声速。结果汇总于表 I。

我们发现，CS 状态方程给出的结果与最精确的 mKLM 相当接近。其他方法则会导致明显偏差。相对偏差最高可达 $\sim 20\%$。PV-v 和 PV-μ 方法低估压缩因子和声速，并高估超额熵。相比之下，PY-c 方法高估压缩因子和声速，并低估超额熵。

图 1 展示了使用硬球状态方程的不同近似，根据式 (15) 计算得到的 Γ 对 η 的依赖关系。在 η较低时，各曲线几乎重合，但进入致密流体区域后便开始分化。在所有

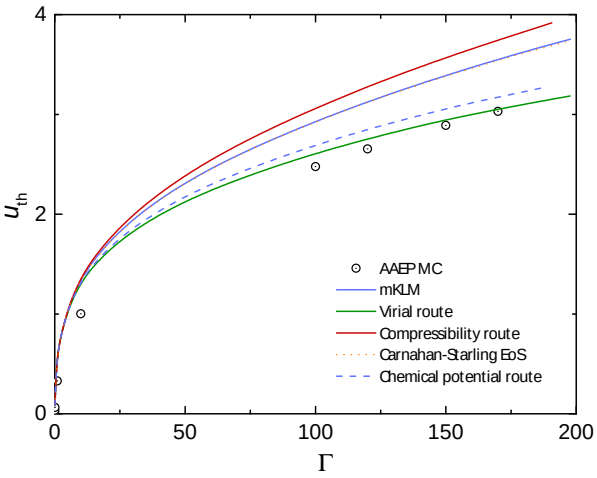

图 2.（在线彩色）强耦合单组分等离子体流体的超额能量热分量。圆圈表示文献 [11] 中的 AAEP 蒙特卡罗数值数据。不同曲线对应采用不同 HS 熵的变分计算，见图例。在强耦合下，结合维里途径的 Percus–Yevick 理论与蒙特卡罗数据符合最好。

近似中，除 mKLM 外， Γ 均随 η单调增加。相比之下，在 mKLM 方法中，耦合参数在高密度下会随 η 非物理地减小。不过，这种情况出现在超过 mKLM 适用上限的密度下（即 $\eta \gtrsim 0.55$），因此仅仅反映了 mKLM 状态方程在该区域的不准确性。

接下来，我们使用式 (6) 计算单组分等离子体流体的超额能量。为了使比较更加明显，流体静态能量（流体马德隆能，也称为离子球模型能量 [7, 8, 18, 31, 32]），

$$u_{\rm st} = -\frac{9}{10}\Gamma, \tag{16}$$

已从总超额能量中扣除（注意，式（16）的离子球模型结果可通过在 $\eta = 1$ 这一非物理取值处计算式（6）得到；这是一种适用于其他势的一般方法；例如，参见 [32], 其中讨论了 Yukawa 相互作用势的情形）。剩余部分通常称为超额能量的热分量，因为它取决于温度。图 2 将其与文献 [11] 中最新的蒙特卡罗数据一同绘出。不出所料，不同的硬球状态方程对单组分等离子体超额热能的预测精度各不相同。或许令人意外的是，精度最高的 mKLM 和 CS 模型并不能很好地再现参考蒙特卡罗数据。最准确的近似基于 PY 维里途径 [33]。基于化学势途径的方法精度稍逊。其他方法则高估了超额能量的热分量。

IV. 讨论与结论

首先要指出的是，硬球状态方程和熵本身的准确性，并不能保证变分计算对单组分等离子体超额能量的准确性。相反，用于计算硬球系统熵的径向分布函数$g_0(r)$与用于计算单组分等离子体系统超额能量的径向分布函数之间的一致性，发挥着更为重要的作用。DeWitt 和 Rosenfeld [33] 早已指出这一点：虽然 Carnahan–Starling 状态方程对硬球的描述优于 PY 维里状态方程或 PY 可压缩性状态方程，但 CS 熵与用于计算单组分等离子体超额能量的 PY $g_0(r)$ 并不一致。然而，硬球流体的 PY 维里熵在一致性方面表现良好，因为它是由用于计算单组分等离子体超额能量的同一 $g_0(r)$ 得出的。这就是更准确的 mKLM 状态方程并未优于其他状态方程的原因；它在变分计算中的表现与 CS 状态方程非常接近。PY 化学势路径在概念上比 PY 可压缩性途径 [29]，更接近 PY 维里途径，这可以解释它为何与蒙特卡罗结果更加吻合。

图 2 所示变分方法的准确性或许并不特别令人振奋。然而，应当认识到，对于单组分等离子体流体这类具有软长程相互作用的体系，超额能量中的热分量仅占总超额能量的一小部分。在流体-固体相变附近，热分量仅占总超额能量的约 2%。这意味着热分量存在一些误差，也不会显著影响总超额能量的精确值。举一个具体例子，在 $\Gamma = 150$，$N = 10^5$ 个粒子的蒙特卡洛模拟结果为 $u_{\rm ex} = -132.1104$ [11]。采用 PY 维里硬球状态方程的变分计算得出 $u_{\rm ex} \simeq -132.06$，相对偏差仅为 0.04%。在所考虑的不同硬球状态方程中，偏差最大的是 PY 可压缩性途径，但即便如此，计算得到的总超额能量为 $u_{\rm ex} \simeq -131.41$，相对偏差为 0.5%。采用 PY 维里硬球熵的变分方法表现出卓越的准确性，这一特点可能有助于研究其他体系，例如强耦合 Yukawa 流体。

最后，我们来讨论约化超额能量热分量的 Rosenfeld-Tarazona 标度。从基于基本测度硬球参考泛函出发，Rosenfeld 和 Tarazona（RT）证明，流体势能的高密度展开由流体马德隆能主导，并带有一个 $\propto T^{3/5}$热修正项 [34]。用我们目前的记号，他们的主要结果可表示为

$$u_{\rm th}(\Gamma) \simeq \alpha \left(\frac{\Gamma}{\Gamma_{\rm fr}}\right)^{2/5}, \qquad (17)$$

其中，$\Gamma_{\rm fr} \simeq 174$ 是单组分等离子体中流体-

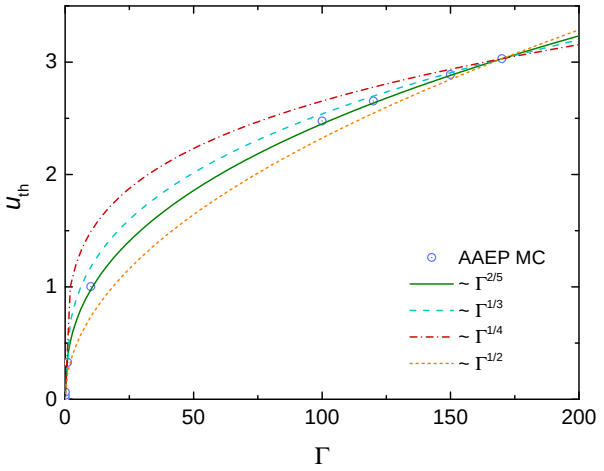

图 3.（在线彩色）强耦合单组分等离子体流体的超额能量热分量。圆圈表示文献 [11] 中的 AAEP 蒙特卡洛数值数据。曲线表示具有不同指数 α 的广义 RT 标度 $u_{\rm th} \propto \Gamma^{\alpha}$。原始指数 $\alpha = 2/5$ 与数值结果符合得更好。

固体相变处的耦合参数，α 是一个与系统相关的参数，通常接近 $\simeq 3$ [31, 35, 36]。原始 RT 标度对各种系统 [37] 都适用得较好，并且是为具有软相互作用的系统 [31, 35, 36]开发简单实用状态方程（EoS）的有效工具。最近，利用大量关于真实系统和模型系统的数据，研究者通过经验研究表明，原始 RT 标度的指数 2/5并非总是最佳选择 [38, 39]。因此，人们提出了广义 RT 标度，其中指数被视为材料相关参数 [39]。此外，可以证明，广义 RT 标度可从两相模型中自然导出。该模型将液体视为气态组分和类固态组分的叠加，其相对含量由液体刚性参数量化；这一结果源于该刚性参数的尺度不变性 [40]。

当前情境为仔细检验单组分等离子体流体这一特殊情形下的 RT 标度提供了绝佳机会。图 3 绘出了文献 [11] 最近一次 AAEP 蒙特卡洛模拟所得的超额能量热分量。图中的各条曲线对应形式为 $u_{\rm th} = \alpha(\Gamma/\Gamma_{\rm fr})^{\beta}$ 的广义 RT 标度，其指数 $\beta = 1/4$ 分别为 1/3、2/5 和 1/2。所有曲线在 $\Gamma = 170$ 和 $u_{\rm th} \simeq 3.03$ 处有一个共同交点。我们发现，原始 RT 指数 $\beta = 2/5$ 与蒙特卡洛结果符合得最好。相应参数 α 为 $\alpha \simeq 3.06$。这与用于构建 Yukawa 流体简易实用状态方程的取值吻合良好 [31, 35, 36]。

总之，我们采用不同版本的硬球状态方程，对单组分等离子体流体的超额能量进行了变分计算，其中包括 Percus–Yevick 理论的三种结果——

（分别采用维里、压缩率和化学势途径）、Carnahan-Starling 状态方程，以及或许是目前最准确的 mKLM 状态方程（见文献 [9]）。尽管此前已在变分方法框架下检验过 PY 维里和 CS 方法 [26, 33], ，但据我们所知，尚未采用 PY 化学势路径和 mKLM 状态方程。我们的比较表明，对于单组分等离子体流体的超额能量，PY 病毒状态方程与近期的蒙特卡洛结果吻合最佳。我们从中得到了一个重要的经验：用于计算的径向分布函数之间的一致性

硬球压力和单组分等离子体能量比硬球状态方程本身的准确性更为重要。已证明该方法在强耦合条件下具有极高的准确性，这使我们有理由相信，它也适用于其他相关系统，尤其是强耦合 Yukawa 流体。这一点值得在未来的研究中加以验证。我们还表明，单组分等离子体流体超额能量的热分量原始 RT 标度与近期蒙特卡罗数据非常吻合。

作者声明不存在利益冲突。

支持本研究结论的数据可向作者提出合理请求后获取。

[1] J.-P. Hansen 和 I. R. McDonald, *Theory of Simple Liquids* - 2006 （ Elsevier，阿姆斯特丹，）。[2] G. A. Mansoori 和 F. B. Canfield，“简单液体平衡热力学性质的变分方法 I”，《化学物理杂志》**51**，4958–4967（1969）。[3] G. A. Mansoori 和 F. B. Canfield，“熔化的变分方法 II”，《化学物理杂志》**51**，4967–4972（1969）。[4] M. Ross，“氩的冲击压缩和熔化曲线”，《物理评论A》**8**，1466–1474（1973）。[5] D. A. Young 和 F. J. Rogers，“采用反十二次方参考势的变分流体理论”，《化学物理杂志》**81**，2789–2793（1984）。[6] M. Ross、H. E. DeWitt 和 W. B. Hubbard，“液态金属的蒙特卡罗与微扰理论计算”，《物理评论A》**24**，1016–1020（1981）。[7] M Baus 和 J. P. Hansen，“简单库仑系统的统计力学”，《物理报告》**59**，1–94（1980）。[8] S. Ichimaru，“强耦合等离子体：高密度经典等离子体与简并电子液体”，《现代物理评论》**54**，1017–1059（1982）。[9] S. Pieprzyk、M. N. Bannerman、A. C. Bra´nka、M. Chudak 和 D. M. Heyes，“通过分子动力学模拟重新审视硬球系统的热力学与动力学性质”，《物理化学化学物理》**21**，6886 6899 2019–（）。[10] G. S. Demyanov 和 P. R. Levashov，“利用角平均 Ewald 势研究百万粒子单组分等离子体：一项蒙特卡罗研究”，《物理评论E》**106**，015204 2022（）。[11] G. S. Demyanov 和 P. R. Levashov，“通过角平均 Ewald 势重新审视单组分等离子体状态方程”，（arXiv，2025）。[12] D. Huang、M. Baggioli、S. Lu、Z. Ma 和 Y. Feng，“揭示尘埃等离子体的超临界动力学及其类液态到类气态动力学交叉”，《物理评论研究》**5**，013149（2023）。[13] S. A. Khrapak 和 A. G. Khrapak，“经典流体剪切黏度和热导率系数的极小值”，《流体物理》**34**，027102（2022）。[14] S. A. Khrapak、Y.-F. Wu 和 C.-R. Du，“单组分等离子体中的二体碰撞方法：我们能接近弗ренкел线到什么程度？”，《等离子体物理》**32**，092114（2025）。[15] S. A. Khrapak，“简单液体中的自扩散是一种随机游走过程”，《分子》**26**，7499（2021）。[16] S.A. Khrapak，《稠密流体输运性质的基本振动模型》，《物理报告》**1050**, 1 (2024). [17] D. H. E. Dubin 和 T. M. O’Neil，《受限非中性等离子体、液体和晶体（热平衡态）》，《现代物理评论》**71**, 87–172 (1999). [18] S. A. Khrapak 和 A. G. Khrapak，《经典二维和三维单组分等离子体的内能》，Contrib. Plasma Phys. **56**, 270–280 (2016). [19] S. Tanaka 和 S. Ichimaru，《强耦合经典单组分等离子体中关联的动力学理论：广义黏弹性形式下的玻璃化转变》，《物理评论A》**35**, 4743–4754 (1987). [20] S. Ichimaru 和 S. Tanaka，《强耦合经典单组分等离子体玻璃化转变的广义黏弹性理论》，《物理评论快报》**56**, 2815 (1986). [21] M Cardenas 和 M.P Tosi，《单组分经典等离子体玻璃化转变的平均场理论》，Phys. B: Condens. Matter **351**, 137 (2004). [22] A. Yazdi、A. Ivlev、S. Khrapak、H. Thomas、G. E. Morfill、H. L¨owen、A. Wysocki 和 M. Sperl，《Yukawa势的玻璃化转变性质：从带电点粒子到硬球》，《物理评论E》**89**, 063105 (2014). [23] S. A. Khrapak，《推挤模型与单组分等离子体中的玻璃化转变》，《化学物理杂志》**160**, 166101 (2024). [24] M. S. Wertheim，《硬球Percus-Yevick积分方程的精确解》，《物理评论快报》**10**, 321 323 1963– ( ). [25] H. D. Jones，《液态金属状态方程的求解方法》，《化学物理杂志》**55**, 2640–2642 (1971). [26] D. Stroud 和 N. W. Ashcroft，《关于经典单组分等离子体热力学的评论》，《物理评论A》**13**, 1660–1663 (1976). [27] E. Thiele，《硬球状态方程》，《化学物理杂志》**39**, 474–479 (1963). [28] N. F. Carnahan 和 K. E. Starling，《非吸引刚性球的状态方程》，《化学物理杂志》**51**, 635–636 (1969). [29] A. Santos，《化学势途径：硬球隐藏的Percus-Yevick状态方程》，《物理评论快报》**109**, 120601 (2012). [30] J. Kolafa、S. Lab´ık 和 A. Malijevsk´y，《稳定区和亚稳区中硬球流体的精确状态方程》，

《物理化学化学物理》**6**, 2335 2340 2004– ( ). [31] Y. Rosenfeld, 《输运系数的超额熵标度和冻结温度标度：Yukawa系统中的自扩散》, 《物理评论E》**62**, 7524–7527 (2000). [32] S. A. Khrapak、A. G. Khrapak、A. V. Ivlev 和 H. M. Thomas, 《Yukawa系统（尘埃等离子体）的离子球模型》, 《等离子体物理》**21**, 123705 (2014). [33] H.E. DeWitt 和 Y. Rosenfeld, 《强耦合下单组分等离子体流体状态方程的推导》, 物理快报 A **75**, 79–80 (1979). [34] Y. Rosenfeld 和 P. Tarazona, 《密度泛函理论与经典固体和流体自由能的渐近高密度展开》, 分子物理学 **95**, 141– 150 (1998). [35] S. A. Khrapak 和 H. M. Thomas, 《Yukawa流体内能和压力的实用表达式》, 《物理评论E》**91**, 023108 (2015). [36] S. A. Khrapak、N. P. Kryuchkov、S. O. Yurchenko 和 H. M. Thomas, “强耦合下 Yukawa系统的实用热力学”, 《化学物理杂志》**142**, 194903 (2015). [37] T. S. Ingebrigtsen、A. A. Veldhorst、T. B. Schrøder 和 J. C. Dyre, “通讯：液体比热的 Rosenfeld-Tarazona表达式：对十八种系统的数值研究”, 《化学物理杂志》**139**, 171101 (2013). [38] S. A. Khrapak, “强耦合 Yukawa流体的熵”, 《物理评论E》**110**, 034602 (2024). [39] S. A. Khrapak 和 A. G. Khrapak, “简单液体的广义 Rosenfeld–Tarazona 标度与高数密度比热”, 《流体物理》**36**, 117119 (2024). [40] S. A. Khrapak 和 A. G. Khrapak, “致密液体的热容：两相模型与熔化温度标度之间的联系”, 《物理学快报》**122**, 240–243 (2025).