УДК 53.519.25

И. П. Базаров
П. Н. Николаев

РЕШЕНИЕ ЦЕПОЧКИ УРАВНЕНИЙ ДЛЯ КОРРЕЛЯЦИОННЫХ ФУНКЦИЙ

Рассматривается решение цепочки уравнений для корреляционных функций на основе малости корреляционных интегралов. Получено решение для однородной системы в первом приближении. Результат совпадает с соответствующим выражением, полученным Н. Н. Боголюбовым разложением функций распределения в ряд по малому параметру, а в случае кристалла — с аналогичным выражением для бинарной функции распределения.

Как известно, в статистической физике наряду с функциями распределения $F_s(q_1, ..., q_s)$ или $\rho_s(q_1, ..., q_s)$ используются также и различные корреляционные функции $g_s(q_1, ..., q_s)$, связанные с $\rho(q_1, ..., q_s)$, например соотношениями [1, 2]:

$$\begin{aligned}
&\rho_1(q_1) = g_1(q_1),\\
&\rho_2(q_1, q_2) = g_1(q_1)\, g_1(q_2) + g_2(q_1, q_2),\\
&\rho_3(q_1\, q_2, q_3) = g_1(q_1)\, g_1(q_2)\, g_1(q_3) + g_1(q_1)\, g_2(q_2, q_3) +\\
&\quad + g_1(q_2)\, g_2(q_3, q_1) + g_1(q_3)\, g_2(q_1, q_2) + g_3(q_1, q_2, q_3),\\
&\rho_4(q_1, q_2, q_3, q_4) = \prod_{i=1}^{4} g_1(q_i) + \ldots + g_4(q_1, q_2, q_3, q_4).
\end{aligned} \tag{1}$$

Корреляционные функции удовлетворяют цепочке уравнений [2]:

$$\begin{aligned}
&\theta \frac{\partial g_1(q_1)}{\partial q_1^\alpha} + g_1(q_1) \int \frac{\partial \Phi(|q_1 - q_2|)}{\partial q_1^\alpha}\, g_1(q_2)\, dq_2 +\\
&\quad + \int \frac{\partial \Phi(|q_1 - q_2|)}{\partial q_2^\alpha}\, g_2(q_1, q_2)\, dq_2 = 0;\\
&\theta \frac{\partial g_2(q_1, q_2)}{\partial q_1^\alpha} + \frac{\partial \Phi(|q_1 - q_2|)}{\partial q_1^\alpha}\, g_1(q_1)\, g_1(q_2) +\\
&\quad + \frac{\partial \Phi(|q_1 - q_2|)}{\partial q_1^\alpha}\, g_2(q_1, q_2) + g_2(q_1, q_2) \int \frac{\partial \Phi(|q_1 - q_2|)}{\partial q_1^\alpha} \times\\
&\quad \times g_1(q_3)\, dq_3 + g_1(q_1) \int \frac{\partial \Phi(|q_1 - q_3|)}{\partial q_1^\alpha}\, g_2(q_2, q_3)\, dq_3 +\\
&\quad + \int \frac{\partial \Phi(|q_1 - q_3|)}{\partial q_1^\alpha}\, g_3(q_1, q_2, q_3)\, dq_3 = 0;
\end{aligned} \tag{2}$$

$$\theta \frac{\partial g_3(q_1, q_2, q_3)}{\partial q_1^\alpha} + \frac{\partial \Phi(|q_1 - q_2|)}{\partial q_1^\alpha}(g_2(q_2, q_3) g_1(q_1) + $$
$$+ g_2(q_3, q_1) g_1(q_2)) + \frac{\partial \Phi(|q_1 - q_3|)}{\partial q_1^\alpha}(g_2(q_1, q_2) g_1(q_3) +$$
$$+ g_2(q_2, q_3) g_1(q_1)) + \frac{\partial(\Phi(|q_1 - q_2|) + \Phi(|q_1 - q_3|))}{\partial q_1^\alpha} \times$$
$$\times g_3(q_1, q_2, q_3) + g_2(q_1, q_2) \frac{\partial}{\partial q_1^\alpha} \int \Phi(|q_1 - q_4|) \times$$
$$\times g_2(q_3, q_4) dq_4 + g_2(q_1, q_3) \frac{\partial}{\partial q_1^\alpha} \int \Phi(|q_1 - q_4|) \times$$
$$\times g_2(q_2, q_4) dq_4 + g_3(q_1, q_2, q_3) \frac{\partial}{\partial q_1^\alpha} \int \Phi(|q_1 - q_4|) \times$$
$$\times g_1(q_4) dq_4 + g_1(q_1) \frac{\partial}{\partial q_1^\alpha} \int \Phi(|q_1 - q_4|) g_3(q_2, q_3, q_4) dq_4 +$$
$$+ \int \frac{\partial \Phi(|q_1 - q_4|)}{\partial q_1^\alpha} g_4(q_1, q_2, q_3, q_4) dq_4 = 0$$

и условиям нормировки:

$$\int_V g_1(q)\, dq = N, \quad \int_V g_s(q_1, \ldots, q_s)\, dq_1 \ldots dq_s = 0. \tag{3}$$

В работе [2] с помощью корреляционных функций построена теория кристалла с учетом коллективных колебаний.

В настоящей статье, используя особенность входящих в уравнения (2) интегральных членов, содержащих корреляционные функции $g_s(q_1, \ldots, q_s)$ с $s \geqslant 2$ (эти члены в дальнейшем называются корреляционными интегралами), мы изложим новый метод решения уравнений (2) как для газа, так и для кристалла.

В газообразной фазе в объеме $v = \frac{V}{N}$ (приходящемся на одну частицу) корреляция движения частицы с другими частицами имеет место лишь в области, определяемой протяженностью взаимодействия Z_0 и по порядку величины равной r_0^3. Поэтому корреляционные интегралы содержат малый параметр

$$\varepsilon \sim \frac{r_0^3}{v}.$$

В твердом теле $v \sim r_0^3$ корреляция имеет место при движении частиц в области $d < r_0$ [3], и корреляционные интегралы в этом случае имеют малый параметр

$$\varepsilon \sim \frac{d^3}{r_0^3}.$$

Указанная особенность входящих в уравнения (2) корреляционных интегралов позволяет последовательно получить решение этих уравнений.

Нулевое приближение решений уравнений (2) для газа и твердого тела получим, опустив в них интегральные члены. В случае газа $\varphi_1(q)=g_1(q)=\text{const}=c$ и в нулевом приближении из (2) имеем:

$$\frac{\partial g_1^0}{\partial q_1^\alpha}=0,$$

$$\theta\frac{\partial g_2^0(q_1,q_2)}{\partial q_1^\alpha}+c^2\frac{\partial\Phi(|q_1-q_2|)}{\partial q_1^\alpha}+\frac{\partial\Phi(|q_1-q_2|)}{\partial q_1^\alpha}g_2^0(q_1,q_2)=0, \tag{4}$$

$$\theta\frac{\partial g_3^0(q_1,q_2,q_3)}{\partial q_1^\alpha}+c\left\{\frac{\partial\Phi(|q_1-q_2|)}{\partial q_1^\alpha}(g_2^0(q_2,q_3)+g_2^0(q_3,q_1)\right\}+$$
$$+\left\{\frac{\partial\Phi(|q_1-q_3|)}{\partial q_1^\alpha}(g_2^0(q_1,q_2)+g_2^0(q_2,q_3))\right\}+$$
$$+\frac{\partial(\Phi(|q_1-q_2|)+\Phi(|q_1-q_3|))}{\partial q_1^\alpha}g_3^0(q_1,q_2,q_3)=0.$$

. . . .

Отсюда с учетом (3)

$$g_1^0=c=\frac{N}{V},$$

$$g_2^0=c^2\left(\exp\left[-\frac{1}{\theta}\Phi(|q_1-q_2|)\right]-1\right), \tag{5}$$

$$g_3^0=c^3\left\{\exp\left[-\frac{1}{\theta}u_3\right]-\frac{1}{c^2}\left[g_2^0(q_1,q_2)+g_2^0(q_1,q_3)+g_2^0(q_2,q_3)\right]\right\},$$

где

$$u_3=\sum_{1\leqslant i<j\leqslant 3}\Phi(|q_i-q_j|).$$

Найдем выражение для g_2^1. Из (2) и (5) следует:

$$\theta\frac{\partial g_2^1}{\partial q_1^\alpha}+c^2\frac{\partial\Phi(|q_1-q_2|)}{\partial q_1^\alpha}+\frac{\partial\Phi(|q_1-q_2|)}{\partial q_1^\alpha}\times$$
$$\times g_2^1(q_1,q_2)+c^3\int\frac{\partial\Phi(|q_1-q_3|)}{\partial q_1^\alpha}\exp\left[-\frac{1}{\theta}u_3\right]dq_3=0. \tag{6}$$

Так как

$$\frac{1}{\theta}\frac{\partial\Phi(|q_1-q_3|)}{\partial q_1^\alpha}\exp\left\{-\frac{u_3}{\theta}\right\}=$$
$$=-\exp\left\{-\frac{\Phi(|q_1-q_2|)}{\theta}\right\}\frac{\partial}{\partial q_1^\alpha}\exp\left\{-\sum_{1\leqslant i\leqslant 2}\frac{\Phi(|q_i-q_3|)}{\theta}\right\},$$

то из (6) имеем

$$\frac{\partial g_2^1}{\partial q_1^\alpha}+c^2\frac{\partial\Phi(|q_1-q_2|)}{\partial q_1^\alpha}+\frac{\partial\Phi(|q_1-q_2|)}{\partial q_1^\alpha}g_2^1(q_1,q_2)=$$
$$=c^3\exp\left\{-\frac{\Phi(|q_1-q_2|)}{\theta}\right\}\frac{\partial}{\partial q_1^\alpha}\int\exp\left[-\sum_{1\leqslant i\leqslant 2}\frac{\Phi(|q_i-q_3|)}{\theta}\right]dq_3.$$

Положим

$$g_2^1 = c_2^1(q_1, q_2)\exp\left\{-\frac{\Phi(|q_1-q_2|)}{\theta}\right\} - c^2,$$

тогда получим

$$\frac{\partial c_2^1}{\partial q_1^\alpha} = \frac{\partial}{\partial q_1^\alpha}\int \exp\left\{-\sum_{1\leqslant i\leqslant 2}\frac{\Phi(|q_i-q_3|)}{\theta}\right\} dq_3.$$

Это уравнение интегрируется непосредственно. При этом следует учесть, что C_2^1 должна быть симметричной по отношению к аргументам q_1 и q_2. Постоянную интегрирования определяем из условия нормировки (3). Следовательно, имеем

$$g_2^1 = c^3 \exp\left[-\frac{1}{\theta}\Phi(|q|)\right]\left(1 + c\int f(|q-q'|)f(|q'|)\right)dq' - c^2, \quad (7)$$

где

$$f(|q|) = \exp\left[-\frac{1}{\theta}\Phi(|q|)\right] - 1,$$

и

$$q = q_1 - q_2.$$

Боголюбовская функция распределения $F_2(q_1, q_2)$ связана с родовой бинарной функцией распределения $\rho_2(q_1, q_2)$ соотношением

$$F_2(q_1, q_2) = \frac{V^2}{N(N-1)}\rho_2(q_1, q_2).$$

Поэтому, используя (7) и связь g_2 с ρ_2, получим

$$F_2^1(q_1, q_2) = \exp\left\{-\frac{\Phi(|q_1-q_2|)}{\theta}\right\}\left\{1 + \frac{1}{v}\int f(|q_1 - q_2 - q'|)f(|q'|)dq'\right\}. \quad (8)$$

что в точности совпадает с первым приближением для бинарной функции, полученным в [1].

Для кристалла в нулевом порядке имеем:

$$\rho_2^0 = \frac{\exp\left\{-\frac{1}{\theta}[\Phi(|q_1-q_2|) + u(q_1) + u(q_2)]\right\}}{\int dq_2' dq_2' \exp\left\{-\frac{1}{\theta}[\Phi(|q_1'-q_2'|) + u(q_1') + u(q_2')]\right\}}, \quad (9)$$

где

$$u(q) = \int \Phi(|q-q'|)\rho(q')dq'.$$

Полученный результат (9) совпадает с первым приближением для бинарной функции распределения $\rho_2(q_1, q_2)$ кристалла с учетом коллективных колебаний, найденным в работе [2].

ЛИТЕРАТУРА

1. Боголюбов Н. Н. Избранные труды. Т. 2. Киев, 1970.
2. Базаров И. П., Николаев П. Н. «Теор. и матем. физика», 1977, 31, 125.
3. Базаров И. П. Статистическая теория кристаллического состояния. М., 1972.

Поступила в редакцию
30.9 1977 г.
Кафедра
квантовой статистики