КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

УДК 53:519.25:530.145

П. Н. НИКОЛАЕВ

ПЕРВОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ ОДНОЧАСТИЧНОЙ ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ В КОРРЕЛЯЦИОННОЙ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ КРИСТАЛЛА

Приближение мультипликативности бинарной функции распределения позволяет построить логически последовательную теорию кристалла [1]. Ядром интегрального уравнения для ρ_1 является двухчастичный потенциал взаимодействия, например для инертных газов потенциал Леннарда — Джонса.

В [2] путем введения аппроксимационной функции ρ_2, полученной на основе ее асимптотического поведения на малых и больших расстояниях, получено регуляризированное уравнение для ρ_1, учитывающее коллективные взаимодействия в форме, допускающей учет коллективных колебаний. Оно совпадает с аналогичным уравнением, полученным в [3, 4], где потенциальная функция взаимодействия берется из эксперимента и равна

$$K(r) = a\left(1 - \exp\left(-\frac{\Phi(r)}{a}\right)\right), \tag{1}$$

причем параметр a должен определяться из опыта (в [2] $a=\theta$, $\theta=Kk$, где T — абсолютная температура, k — постоянная Больцмана); $\Phi(r)$ — потенциал взаимодействия двух изолированных частиц. Согласно [3] потенциальная функция (1) позволяет произвести некоторый учет коллективных взаимодействий, поскольку только для $a>\Phi$ формула совпадает с соответствующим выражением для парных взаимодействий.

Покажем, что первое приближение для ρ_1 в формализме корреляционных функций распределения дает выражение для $K(r)$, в точности совпадающее с (1), где, как и в [2], $a=\theta$.

Запишем стационарную систему уравнений Боголюбова для родовых функций распределения

$$\theta\frac{\partial\rho_1}{\partial q_1^\alpha} + \int\frac{\partial\Phi(q_1-q_2)}{\partial q_1^\alpha}\rho_2(q_1, q_2)\,dq_2 = 0,$$

$$\theta\frac{\partial\rho_2}{\partial q_1^\alpha} + \frac{\partial\Phi(q_1-q_2)}{\partial q_1^\alpha}\rho_2 + \int\frac{\partial\Phi(q_1-q_2)}{\partial q_1^\alpha}\rho_3(q_1, q_2, q_3)\,dq_3 = 0 \tag{2}$$

. . . .

с условием нормировки

$$\int\cdots\int\rho_s(q_1, q_2, \ldots, q_s)\,dq_1\,dq_2\ldots dq_s = \frac{N!}{(N-s)!}, \tag{3}$$

$$s = 1, 2\ldots N.$$

Введем корреляционные функции с помощью соотношений [6]

$$\rho_2(q_1, q_2) = \rho_1(q_1)\rho_1(q_2) + g_2(q_1, q_2),$$
$$\rho_3(q_1, q_2, q_3) = \rho_1(q_1)\rho_1(q_2)\rho_1(q_3) + g_2(q_1, q_2)\rho_1(q_3) + g_2(q_1, q_3)\rho_1(q_2) + $$
$$+ g_2(q_2, q_3)\rho_1(q_1) + g_3(q_1, q_2, q_3). \tag{4}$$

Из (2), (3), (4) следует

$$\theta \frac{\partial \rho_1(q_1)}{\partial q_1^\alpha} + \rho_1(q_1)\frac{\partial u(q_1)}{\partial q_1^\alpha} + z(q_1) = 0,$$

$$(5)$$

$$\theta \frac{\partial g_2(q_1, q_2)}{\partial q_1^\alpha} + \frac{\partial \Phi(q_1 - q_2)}{\partial q_1^\alpha}\rho_1(q_1)\rho_1(q_2) +$$
$$+ \frac{\partial \Phi(q_1 - q_1)}{\partial q_1^\alpha} g_2(q_1, q_2) + g_2(q_1, q_2)\frac{\partial u(q_1)}{\partial q_1^\alpha} +$$
$$+ \rho_1(q_1)\frac{\partial \varphi(q_1, q_2)}{\partial q_1^\alpha} + \int \frac{\partial \Phi(q_1 - q_3)}{\partial q_1^\alpha} g_3(q_1, q_2, q_3)\, dq_3 = 0$$

и условие нормировки:

$$\int \rho_1(q)\, dq = N, \tag{6}$$
$$\int g_s(q_1), \ldots, q_s dq_1, \ldots, dq_s = 0, \; s \geqslant 2,$$

где

$$u(q_1) = \int \Phi(q_1 - q')\rho_1(q')\, dq',$$
$$z(q_1) = \int \frac{\partial \Phi(q_1 - q')}{\partial q_1^\alpha} g_2(q_1, q')\, dq', \tag{7}$$
$$\varphi(q_1, q_2) = \int \Phi(q_1 - q') g_2(q_2, q')\, dq'.$$

Отбрасываем интегральные члены, содержащие корреляционные функции. Возможность такого подхода подробно обсуждается в [7]. Заметим лишь, что данный подход применим для систем с произвольной плотностью и интенсивностью взаимодействия. В нулевом приближении для ρ_1 и ρ_2 имеем

$$\rho_1 = A \exp\left[-\frac{u(q_1)}{\theta}\right],$$
$$\rho_2 = B \exp\left[-\frac{1}{\theta}\Phi(q_1 - q_2)\right]\rho_1(q_1)\rho_1(q_2), \tag{8}$$

где

$$A^{-1} = \int \exp\left[-\frac{1}{\theta} u(q_1)\right] dq_1,$$
$$B^{-1} = \int \exp\left[-\frac{1}{\theta}\Phi(q_1 - q_2)\right]\rho_2(q, q_2)\, dq_1\, dq_2.$$

Подставляя (8) в первое уравнение (2), в первом приближении итерационного цикла имеем

$$\theta \frac{\partial \rho_1(q_1)}{\partial q_1^\alpha} + \int \frac{\partial \Phi(q_1 - q_2)}{\partial q_1^\alpha} \times$$

$$\times \exp\left[-\frac{1}{\theta} \Phi(q_1 - q_2)\right] \rho_1(q_1) \rho_1(q_2) B dq_2 = 0. \quad (9)$$

Интегрируя (9) и учитывая симметрию $\rho_1(q_1)$, получаем

$$\theta \ln \rho_1(q_1) + B \int K(q_1 - q') \rho_1(q') dq' = \ln a, \quad (10)$$

где

$$\alpha = \text{const},$$

$$K(q_1 - q') = \theta\left(1 - \exp\left[-\frac{1}{\theta} \Phi(q_1 - q')\right]\right). \quad (11)$$

Ищем решение в виде

$$\rho_1(q_1) = \alpha \exp\left[-\frac{V(q_1)}{\theta}\right], \quad \alpha^{-1} = \int \rho_1(q_1) dq_1 \quad (12)$$

и тогда

$$V(q_1) = \alpha B \int K(q_1 - q_2) \exp\left[-\frac{V(q_2)}{\theta}\right] dq_2. \quad (13)$$

В первом приближении полагаем $B = 1$ и окончательно

$$V(q_1) = \alpha \int K(q_1 - q_2) \exp\left[-\frac{V(q_2)}{\theta}\right] dq_2. \quad (14)$$

Это уравнение полностью совпадает с соответствующим уравнением, полученным в [3].

Таким образом, в первом приближении унарной функции распределения получено уравнение, учитывающее коллективные взаимодействия в форме, допускающей учет коллективных колебаний.

В заключение автор выражает благодарность проф. И. П. Базарову за большую помощь в работе.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Базаров И. П. Статистическая теория кристаллического состояния. М., 1972.
2. Базаров И. П. «ДАН СССР», 1966, **170**, 312.
3. Власов А. А. Теория многих частиц. М.—Л., 1950.
4. Власов А. А. «Вестн. Моск ун-та», 1946, № 3—4, 63—96.
5. Боголюбов Н. Н. Избр. труды, т. 2. Киев, 1970, с. 99.
6. Базаров И. П., Николаев П. Н. «Теор. и мат. физика», 1977, **31**, 125.
7. Базаров И. П., Николаев П. Н. «Вестн. Моск. ун-та. Физ., астрон.», 1978, **19**, № 3, 67.

Кафедра
квантовой статистики

Поступила в редакцию
31.01.78