$H=2{,}6$ кЭ, которые демонстрируют поворот плоскости поляризации на 90°. Аналогичного эффекта управления поляризацией волны в гематите можно добиться, меняя величину магнитного поля при $\varphi=\mathrm{const}$. Такие экспериментальные зависимости приведены на рис. 5. Уменьшение глубины модуляции амплитуды при снижении поля объясняется в основном различием затухания нормальных мод, что эквивалентно различию амплитуд складывающихся волн (7), и, очевидно, может быть компенсировано изменением угла $\varphi$.

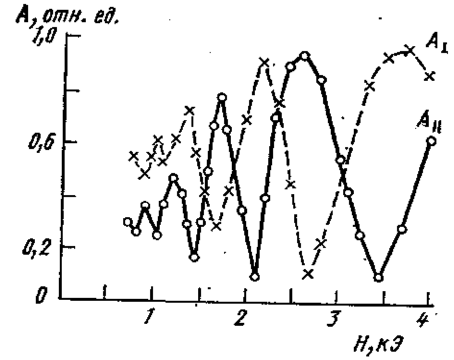


Рис. 5. Зависимость амплитуд параллельной и перпендикулярной оси x компонент поляризации от напряженности магнитного поля ($\varphi=22{,}5°$; $f=45$ МГц)

Проведенные исследования показали, что затухание и поляризация магнитоупругих волн в гематите сильно зависят от величины и направления внешнего магнитного поля. Эти эффекты могут быть использованы для создания магнитоакустических устройств с управляемой поляризацией.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ


[1] Seavey M. H. Solid State Comm., 1972, **10**, p. 219. [2] Максименков П. П., Ожогин В. И. ЖЭТФ, 1973, **65**, с. 657. [3] Бережнов В. В., Евтихиев Н. Н., Преображенский В. Л., Экономов Н. А. Радиотехн. и электроника, 1983, № 2, с. 376. [4] Лямов В. Е. Поляризационные эффекты и анизотропия взаимодействия акустических волн в кристаллах. М.: Изд-во МГУ, 1983. [5] Ожогин В. И., Преображенский В. Л. ЖЭТФ, 1977, **73**, с. 989.



Поступила в редакцию
25.09.84

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ, 1985, Т. 26, № 5

УДК 536.758


# О ТРОЙНЫХ КОРРЕЛЯЦИЯХ В ЖИДКОСТЯХ


**П. В. Елютин**

*(кафедра квантовой радиофизики)*


Задача определения последовательности $n$-частичных функций распределения $g_n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_n)$ является одной из основных в статистической механике [1]. Двухчастичная функция $g_2(r_{12})$, определяющая в системе с парным взаимодействием большинство равновесных термодинамических свойств, может быть вычислена из экспериментальных данных по рассеянию. Трехчастичную функцию распределения $g_3$ представим в виде

$$g_3(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)=G\chi, \qquad G=g_2(r_{12})g_2(r_{23})g_2(r_{31}).$$

Она несет информацию об угловых корреляциях и входит в выражения, определяющие производные от $g_2$ по термодинамическим параметрам, что дает возможность экспериментального определения некоторых функционалов от $g_2$ [2].

Априорно функция $\chi$ должна быть инвариантна при перестановке своих аргументов и должна удовлетворять принципу ослабления корреляций: $\chi \to 1$, если $r_{ij} \to \infty$.

Суперпозиционное приближение $\chi \equiv 1$ было введено Кирквудом [3]. Полвека исследований показало его качественную правильность: отличие $\chi$ от единицы обычно невелико. Однако количественное определение $\chi$ встречает значительные трудности. Вириальное разложение $\chi$, построенное Абе [4], активно исследуется до настоящего времени [5, 6]. Использование перенормированных разложений приводит к задачам о решении систем нелинейных интегральных уравнений, содержащих интегралы высокой ($\geqslant 6$) кратности. Немногим лучше обстоит дело и с прямым численным моделированием. В доступном современным компьютерам эксперименте методом Монте-Карло с несколькими сотнями частиц и числом конфигураций порядка $10^6$ [7—10] функция $g_2$ определяется с ошибкой в 1—2%, в то время как ошибка в определении $\chi$ составляет 5—10% и сравнима с величиной отклонений $\chi$ от единицы.

Цель настоящей заметки — указать простой подход к определению $\chi$, отличный от названных выше.

Рассмотрим однородную систему частиц, взаимодействие которых описывается парным потенциалом $U(r_{ij})$. Внутренняя энергия такой системы есть

$$E = N\left[\frac{3}{2}kT + \frac{\rho}{2}\int U(\mathbf{r})\, g_2(\mathbf{r})\, d\mathbf{r}\right],$$

где $N$ — число частиц, $T$ — температура, $\rho$ — плотность, $k$ — постоянная Больцмана. Очевидно, $E$ не зависит от $g_n$ с индексами $n \geqslant 3$. В равновесном состоянии при фиксированной величине $E$ энтропия системы $S$ должна быть максимальна. Для энтропии имеется кластерное разложение [11]

$$S = Nk\left[s_1 + \sum_{n=2}^{\infty} s_n\right], \tag{1}$$

где $s_1$ — удельная энтропия идеального газа, а $s_n$ при $n \geqslant 2$ есть вклад в энтропию от $n$-частичных корреляций, пропорциональный $\rho^{n-1}$ и зависящий от $g_m$ с $m \leqslant n$. Например,

$$s_2 = -\frac{\rho}{2}\int g_2(\mathbf{r}) \ln g_2(\mathbf{r})\, d\mathbf{r},$$

$$s_3 = -\frac{\rho^2}{6}\int\int \chi \ln \chi\, G(r,\ s,\ t)\, d\mathbf{r} d\mathbf{s}.$$

Здесь введены обозначения $\mathbf{r} = \mathbf{r}_{12}$, $\mathbf{s} = \mathbf{r}_{13}$, $\mathbf{t} = \mathbf{r}_{23}$. Параметры $T$ и $\rho$ фиксируют $s_1$, а задание вида $g_2(r)$ фиксирует $s_2$. Поэтому изменяться может только сумма $\Sigma s_n$ с $n \geqslant 3$. Считая этот ряд быстро сходящимся, вместо точного условия максимальности суммы потребуем максимальности трехчастичного вклада в энтропию $s_3$: естественно допустить, что именно он дает основной вклад в сумму. Это единственное приближение, которое мы делаем.

Заметим, что идея использования вариационного принципа для свободной энергии не нова. В таком контексте она была введена Ричардсоном [12]. Однако использованное им предположение $\chi = \mathrm{const} \neq 1$ противоречит условию ослабления корреляций и делает результаты неприемлемыми.

Итак, задача сводится к отысканию условий экстремальности функционала $s_3$ на допустимых функциях $\chi$. Одним из условий, ограничивающих возможные $\chi$, является второе уравнение системы ББГКИ [1]:

$$-\frac{d}{dr}\ln g_2(r)-\frac{d\Phi(r)}{dr}=\rho\int ds\,\frac{d\Phi(s)}{ds}\cos\theta_{rs}g_2(s)g_2(t)\,\chi. \tag{2}$$

Здесь $\Phi(r)=U(r)/(kT)$ — безразмерный потенциал взаимодействия, $\theta_{rs}$ — угол между векторами **r** и **s**. Функция $\chi$ должна быть инвариантна при перестановках аргументов; поэтому вместе с (2) следует рассматривать еще пять уравнений, получающихся перестановками $r$, $s$ и $t$. При заданных $\Phi(r)$ и $g_2(r)$ решения (2) не связаны условием ослабления корреляций. Поэтому оно должно быть сформулировано отдельно; мы запишем его в виде

$$\int G(\chi-1)\,d\mathbf{r}d\mathbf{s}=\text{const}. \tag{3}$$

Умножая уравнение (2) на $g_2(r)$ и учитывая дополнительные условия (2) и (3) (множителями Лагранжа $\lambda(r)$ и $\mu$ соответственно), из условия стационарности $s_3$ получаем уравнение

$$G\left[1+\ln\chi-\lambda(r)\frac{d\Phi(s)}{ds}\cos\theta_{rs}-''5''-\mu\right]=0. \tag{4}$$

Здесь «5» означает пять членов, получаемых из предыдущего перестановками $r$, $s$ и $t$. Из условия ослабления корреляций следует $\mu=1$. Итак,

$$\begin{gathered}\chi(r,\ s,\ t)=\exp[\varphi(r;\ s,\ t)-\varphi(s;\ t,\ r)+\varphi(t;\ r,\ s)],\\ \varphi(a;\ b,\ c)=\lambda(a)\left[\frac{d\Phi(b)}{db}\cos\theta_{ab}+\frac{d\Phi(c)}{dc}\cos\theta_{ac}\right].\end{gathered} \tag{5}$$

Неизвестная функция $\lambda(a)$ определяется подстановкой (5) в уравнение (2), которая приводит к интегральному уравнению, содержащему двукратный интеграл.

Детальные вычисления не входят в нашу задачу. Однако некоторые свойства $\chi$ можно определить сравнительно просто. Обратимся за примером к системе с потенциалом Леннард-Джонса

$$\Phi(r)=4\frac{T_0}{T}\left[\left(\frac{a}{r}\right)^{12}-\left(\frac{a}{r}\right)^{6}\right],$$

подробно изученной в области умеренных плотностей $\rho^*=\rho a^3\leqslant 1$ и температур $T^*=T/T_0\sim 1$. В точке $r_0=2^{1/6}a$ сила $d\Phi/dr$ обращается в нуль, поэтому $\chi(r_0, r_0, r_0)=1$; этот вывод согласуется с результатами [5]. В малой окрестности $r_0$ можно считать $\lambda=\text{const}=\lambda(r_0)$. Величину $\lambda(r_0)$ можно оценить, сузив класс пробных функций (5) условием $\lambda=\text{const}=\lambda_0$ при $|r-r_0|<\Delta$, $\lambda=0$ при $|r-r_0|>\Delta$, где $\Delta$ — ширина первого пика функции $g_2$ (положение максимума $g_2(r)$ совпадает с $r_0$). Расчет с использованием данных [5] дает $\lambda_0\approx +10^{-2}$. Положительность $\lambda_0$ означает, что $[\chi(r,\ r,\ r)-1](r-r_0)\geqslant 0$; иначе говоря, первый максимум функции $g_3(r,\ r,\ r)$ сдвигается по сравнению с первым максимумом $g_2(r)$ в сторону бо́льших $r$. Это согласуется как с данными численных экспериментов [7—9], так и с выводами, основанными на вириальном разложении [5].

Полученные выше результаты представляются разумными, а малая величина $\ln\chi$ согласуется с исходными допущениями. Однако необходимо заметить, что хотя быстрая сходимость ряда в (1) и не вызывает сомнений, пренебрежение высшими членами $s_n$ — пусть малыми, но зависящими от $\chi$ — до варьирования есть шаг, корректность которого нуждается, вообще говоря, в дополнительном обосновании.

Автор благодарит И. М. Соколова за многочисленные дискуссии и А. С. Михайлова — за обсуждение формальных моментов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Балеску Р. Равновесная и неравновесная статистическая механика. Т. I, гл. 7. М.: Мир, 1978. [2] Egelstaff P. A., Page D. I., Heard C. R. T. J. of Phys. C., 1971, 4, p. 1453. [3] Kirkwood J. G. J. Chem. Phys., 1935, 3, p. 300. [4] Abe R. Progr. Theor. Phys., 1959, 21, p. 421. [5] Haymet A. D. J., Rice S. A., Madden W. G. J. Chem. Phys., 1981, 75, p. 4696. [6] Sane R. N. Phys. Rev. A, 1982, 25, p. 1779. [7] Rahman A. Phys. Rev. Lett., 1964, 12, p. 575. [8] Krumhansl J. A., Wang S. S. J. Chem. Phys., 1972, 56, p. 2034. [9] Raceche H. J., Mountain R. D., Streett W. B. Ibid., 1972, 57, p. 4999. [10] Gupta S., Haile J. M., Steele W. A. Chem. Phys., 1982, 72, p. 425. [11] Фишер И. З. Статистическая теория жидкостей. М.: Физматгиз, 1961. [12] Richardson A. J. Chem. Phys., 1956, 23, p. 2304.

Поступила в редакцию
15.10.84

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ, 1985, Т. 26, № 5

УДК 530.1; 532.782; 536.423

# ОПИСАНИЕ СВОЙСТВ ВЕЩЕСТВА В ШИРОКОЙ ОКРЕСТНОСТИ КРИТИЧЕСКОЙ ТОЧКИ

**Л. П. Филиппов**

*(кафедра молекулярной физики)*

Содержание данной публикации продолжает цикл исследований, начатый работами [1—5]. В подходе автора важны: 1) принципиальный учет существования границы области термодинамической устойчивости — спинодали [6]; 2) введение переменных, характеризующих удаленности точки на $\rho T$-диаграмме от спинодали и от ортогональной ей линии симметрии системы жидкость — пар; 3) аппроксимация уравнения спинодали, справедливая в широкой области состояний, и аналогичная аппроксимация для кривой сосуществования, бинодали; 4) ряд конкретных, простых и общих соотношений, существенно расширяющих известные формулы масштабной теории.

Первый из этих пунктов делает данное направление работ близким к исследованиям авторов [7, 8] и отчасти [9, 10]. Второй и третий пункты дают возможность ввести переменные, пригодные для описания свойств в *широкой области состояний,* четвертый демонстрирует высокую эффективность всего подхода.

Упомянутое уравнение спинодали имеет вид

$$\omega \equiv \frac{\rho-\rho_к}{\rho_к} = (\operatorname{sign}\omega) kB(-\vartheta)^\beta - (B-1)\vartheta, \quad \vartheta \equiv \frac{T-T_к}{T_к}, \tag{1}$$

где $\rho$ — плотность, а уравнение бинодали

$$\omega = (\operatorname{sign}\omega) B(-\vartheta)^\beta - (B-1)\vartheta, \tag{2}$$

индекс к относится к критической точке. Формально эти уравнения отличаются друг от друга множителем $k$ в (1), играющим роль универсального параметра. По нашему анализу, основанному на фактиче-