перестраиваться нестабильная конфигурация под действием квантовых возмущений. Этот вопрос не может быть решен в однопетлевом приближении из-за учета существенно непертурбативных эффектов. Необходимость изучения их влияния становится особенно важной в связи с расходимостью формально построенного ряда теории возмущения для пертурбативного вакуума (когда $A^{\alpha}_{\mu}=0$) в инфракрасной области малых импульсов, что связано с отсутствием в этой области малого параметра. Поиск точных решений — один из методов, позволяющих выйти за рамки стандартной теории возмущений. Существует другой метод, основанный на исследовании уравнения Швингера—Дайсона для глюонного пропагатора в инфракрасной области (см., напр. [9, 10]). Полученные из ИК-лагранжианов нелинейные уравнения для компонент вектор-потенциала также учитывают непертурбативные эффекты взаимодействия полей. Точные решения этих уравнений обсуждались, например, в работе [11].

Учет взаимодействия полей ЯМ с полями материи (кварками) может приводить также и к восстановлению интегрируемости системы уравнений (2), что становится актуальным в связи с обсуждавшейся проблемой стохастичности сферически-симметричных решений уравнений ЯМ [12].

Авторы признательны проф. В. Ч. Жуковскому за ценные замечания при обсуждении статьи.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Хуанг К. Кварки, лептоны и калибровочные поля. М., 1985.
[2] Соколов А. А., Тернов И. М., Жуковский В. Ч., Борисов А. В. Калибровочные поля. М., 1986.
[3] Rubakov V. A.//Nucl. Phys. 1982. **B203**, N 2. P. 311; Рубаков В. А.//Письма в ЖЭТФ. 1981. **33**, № 12. С. 658.
[4] Callan C. G.//Phys. Rev. 1982. **D26**, N 8. P. 2058.
[5] Wilczek F.//Phys. Rev. Lett. 1982. **48**, N 17. P. 1146.
[6] Wu T. T., Yang C. N.//Phys. Rev. 1975. **D12**, N 12. P. 3845.
[7] Jackiw R., Rebbi C.//Phys. Rev. 1976. **D13**, N 12. P. 3398.
[8] Marciano W. J., Muzinich I. J.//Phys. Rev. Lett. 1983. **50**, N 14. P. 1035.
[9] Алексеев А. И., Арбузов Б. А., Байков В. А.//ЖЭТФ. 1982. **52**, № 2. С. 187.
[10] Baker M., Dall J. S., Zachariasen F.//Nucl. Phys. 1983. **B229**, N 2. P. 445.
[11] Алексеев А. И., Вшивцев А. С., Татаринцев А. В.//ТМФ. 1988. **77**, № 2. С. 266.
[12] Матинян С. Г., Прохоренко Е. Б., Саввиди Г. К.//Письма в ЖЭТФ. 1986. **44**, № 3. С. 109.

Поступила в редакцию
01.04.94

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1995. Т. 36, № 1

УДК 539.21

РАЗЛОЖЕНИЕ ПО СТЕПЕНЯМ ПЛОТНОСТИ ДЛЯ РАДИАЛЬНОЙ ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ СИСТЕМЫ ТВЕРДЫХ СФЕР

П. Н. Николаев, Е. В. Олейник

(кафедра квантовой статистики и теории поля)

До сих пор были известны значения первых четырех функций, зависящих от расстояния r в разложении радиальной функции распределения $\rho(r)$ в ряд по степеням плотности ρ системы твердых сфер. В работе найдено значение пятой функции на основе использования метода ускоренной сходимости рядов теории возмущений. Также дано выражение для бинарной функции распределения, хорошо описывающей результаты машинного эксперимента для системы твердых сфер.

Первые попытки вычисления радиальной функции распределения системы твердых сфер были предприняты еще Кирквудом в 1935 г. [1]. Для системы твердых сфер потенциал взаимодействия имеет вид

$$V(|q|)=\begin{cases} 0, & |q|\geqslant\sigma, \\ \infty, & |q|\leqslant\sigma, \end{cases} \tag{1}$$

где σ — диаметр твердых сфер. Если записать разложение для радиальной функции распределения этой системы по степеням плотности в виде

$$g=\exp[-V(r)/kT]\,\overline{g}=\exp[-V(r)/kT]\left\{1+\sum_{i=1}^{\infty}\rho^i g_i(r)\right\}, \tag{2}$$

то результат Кирквуда для $g_1(r)$ имеет вид

$$g_1(r)=\begin{cases} \frac{2}{3}\pi\left(2-\frac{3}{2}r+\frac{1}{8}r^3\right), & r\leqslant 2, \\ 0, & r\geqslant 2, \end{cases} \tag{3}$$

где $r=|q|/\sigma$. В работе [2] была найдена следующая функция $g_2(r)$:

$$g_2(r)=\frac{1}{2}\{g_1(r)\}^2+\varphi(r)+2\psi(r)+\frac{1}{2}\chi(r), \tag{4}$$

где

$$\varphi(r)=$$
$$=\begin{cases} \pi^2\left(\frac{r^6}{1260}+\frac{r^4}{20}-\frac{r^3}{6}-\frac{r^2}{4}+\frac{9r}{5}-\frac{9}{4}+\frac{27}{70r}\right) & \text{при } 1\leqslant r\leqslant 3, \\ 0 & \text{при } r\geqslant 3, \end{cases} \tag{5}$$

$$\psi(r)=$$
$$=\begin{cases} \pi^2\left(\frac{r^6}{1260}-\frac{r^4}{20}+\frac{r^3}{6}+\frac{r^2}{4}-\frac{97r}{60}+\frac{16}{9}-\frac{9}{35r}\right) & \text{при } 1\leqslant r\leqslant 2, \\ 0 & \text{при } r\geqslant 2, \end{cases} \tag{6}$$

$$\chi(r)=-\{g_1(r)\}^2+\pi^2\left\{-\frac{3}{280}r^4+\frac{41}{420}r^2\right\}(3-r^2)^{1/2}+$$
$$+\pi\left\{-\frac{23}{15}r+\frac{36}{35}\frac{1}{r}\right\}\arccos\{r[3(4-r^2)]^{-1/2}\}+$$
$$+\pi\left\{3{,}1560r^6-\frac{r^4}{15}+\frac{r^2}{2}+\frac{2r}{15}-\frac{9}{35}\frac{1}{r}\right\}\times$$
$$\times\arccos\{(r^2+r-3)[3(4-r^2)]^{-1/2}\}+$$
$$+\pi\left\{\frac{3r^6}{560}-\frac{r^4}{15}+\frac{r^2}{2}-\frac{2r}{15}+\frac{9}{35r}\right\}\times$$
$$\times\arccos\{(-r^2+r+3)[3(4-r^2)]^{-1/2}\}\ \text{при } 1\leqslant r\leqslant\sqrt{3}. \tag{7}$$

В работе [3] наряду с функцией g_2 была вычислена также функция g_3, правда численно, а не в аналитической форме. В этой же работе проведены расчеты для радиальной функции распределения $g(r)$ при $\rho/\rho_0=0{,}5$ ($\rho_0=\sqrt{2}/\sigma^3$) на основе разложения по степеням плотности при учете членов до g_3 включительно, а также на основе решения уравнения Перкуса—Йевика и уравнения Борна—Грина—Ивона. Здесь же даны результаты расчетов по методу молекулярной динамики для данного случая.

Бинарная функция распределения системы твердых сфер широко используется в термодинамической теории возмущений для вычисления потенциала Гельмгольца и других термодинамических систем с более сложными потенциалами взаимодействия. Разложение по степеням плотности (2) сходится достаточно медленно. Поэтому актуальной является задача получения такого ряда функции g по степеням ρ, который сходился быстрее. От этого нового ряда всегда можно перейти к ряду типа (2) и оценить те функции в данном разложении, которые в настоящее время не поддаются прямому расчету.

Для решения этой задачи исходим из следующих соображений. Используем хорошо известное выражение для системы твердых сфер:

$$\frac{p}{\Theta\rho} = 1 + B_2\rho g(\sigma, \rho) = -\frac{\partial F}{\partial V}\frac{1}{\Theta\rho}; \quad B_2 = \frac{2\pi\sigma^3}{3}, \tag{8}$$

где p — давление, ρ — плотность системы, F — потенциал Гельмгольца, $\Theta = kT$. Из данного соотношения находим

$$g(\sigma, \rho) = \left(\frac{p}{\Theta\rho} - 1\right)\Big/ B_2\rho = \left(-\frac{\partial F}{\partial V}\frac{1}{\Theta\rho} - 1\right)\Big/ B_2\rho. \tag{9}$$

Для вычисления функции Гельмгольца системы твердых сфер разработан метод, позволивший по известным на настоящее время семи вириальным коэффициентам вычислить F с точностью, равной точности машинного эксперимента, т. е. не менее 0,5% для всех значений ρ однородной фазы [4].

Суть метода заключается в том, что мы переходим от функции F к новой функции q на основе соотношения

$$F = F_0 - \Theta m \ln q, \tag{10}$$

где $F_0 = -\Theta \ln Q_0$ — свободная энергия основного приближения $q = (Q/Q_0)^{1/(Nm)}$, $m = z/2$, z — число ближайших соседей, выбор которого осуществляется при конкретизации постановки задачи, Q — статистический интеграл системы. В результате мы имеем возможность развивать теорию возмущений не для F, а для q, т. е. переходим от ряда медленно сходящегося к ряду, сходящемуся, как показывают расчеты, быстрее (по крайней мере в области однородной фазы).

Для конкретизации дальнейшего рассмотрения полагаем, что F_0 соответствует идеальному газу, а $z=6$. В результате имеем

$$F = F_0 - 3\Theta N \ln(1 - b_2\rho - b_3\rho^2 - \ldots) \tag{11}$$

и

$$g(\sigma, \rho) = \frac{1 + (2b_3/b_2)\rho + \ldots}{1 - b_2\rho - b_3\rho^2 - \ldots},$$

где $b_2 = B_2/3$; $b_3 = [B_3/3 - (B_2/3)^2]/2, \ldots,$ B_i — вириальные коэффициенты системы твердых сфер [5].

При вычислении $g(r)$ сохраним структуру функции $g(\sigma, \rho)$. Тогда единственным параметром, для которого можно развивать теорию возмущений, будет величина σ^3. Поэтому естественно сделать замену $\sigma^3 \to \varphi(r, \rho)\sigma^3$ и перейти от ряда $g(r, \rho)$ к ряду теории возмущений для $\varphi(r, \rho)$, где g и φ связаны соотношением

$$g(r, \rho) = \frac{1 + (2b_3/b_2)\rho\varphi(r, \rho) + \ldots}{1 - b_2\rho\varphi(r, \rho) - b_3\varphi^2(r, \rho)\rho^2 - \ldots}. \tag{12}$$

Функция $\varphi(r, \rho)$ изменяется от 1 до 0 при изменении r от σ до ∞.

Будем искать выражение для функции φ в виде разложения по степеням плотности:

$$\varphi = y_0(r) + y_1(r)\rho + y_2(r)\rho^2 + \ldots \tag{13}$$

и определим коэффициенты разложения $\varphi_i(r)$ по известным коэффициентам разложения для функции $g\ (r,\rho)$:

$$g_2(r,\ \rho) = 1 + \frac{B_3}{B_2} g_2^3(r)\rho + \frac{B_4}{B_2} g_2^4(r)\rho^2 + \frac{B_5}{B_2} g_2^5(r)\rho^3 + \ldots, \tag{14}$$

где

$$g_2^3(r) = (1/5)\,[(r/\sigma)^3 - 12r/\sigma + 16], \tag{15}$$

функции $g_2^4(r)$ и $g_2^5(r)$ известны численно [3].

Рассмотрим соотношение (12) для случая, когда левая и правая части представлены в виде рядов по степеням плотности и, приравнивая члены при одинаковых степенях ρ, получим выражение y_0, y_1, y_2 через функции g_2^3, g_2^4, g_2^5:

$$y_0 = g_2^3(r), \tag{16}$$

$$y_1 = \frac{B_4}{B_3}\,[g_2^4(r) - (g_2^3(r))^2], \tag{17}$$

$$y_2 = \frac{B_5}{B_3}\left[g_2^5(r) - 2\,\frac{B_4^2}{B_3B_5}\,g_2^3(r)[g_2^4(r) - (g_2^3(r))^2] - [g_2^3(r)]^3\right]. \tag{18}$$

Выражение (12) совместно с (16), (17), (18) дает искомый результат для радиальной функции распределения.

Разлагая правую часть (12) в ряд по степеням ρ, мы получаем первые члены разложения до g_2^5 включительно, совпадающие с точными значениями, а также приближенные значения для высших функций в разложении g_2 в ряд по степеням ρ. Так, для g_2^6 имеем

$$g_2^6 = y_0^4 + \frac{B_4}{B_6}(y_1^2 + 2y_0y_1) + 3\,\frac{B_5}{B_6}\,y_0y_1. \tag{19}$$

r/σ	g_2^6
1,0	1,0000
1,1	0,0159
1,2	—0,1936
1,3	—0,4325
1,4	—0,2693
1,5	0,0636
1,6	0,1829
1,7	0,3188
1,8	0,3536
1,9	0,2801
2,0	0,1636

В таблице приведены значения этой функции в зависимости от r/σ на отрезке от 1 до 2. В точке $r=\sigma$ эта функция совпадает со своим точным значением. Естественно ожидать, что вблизи этой точки значения найденной функции g_2^6 близки к точным значениям. Те же замечания справедливы и для функции $g(r,\sigma)$ из (12). Поскольку эта функция используется в термодинамической теории возмущений для короткодействующих потенциалов, то высокая точность ее вычисления вблизи точки $r=\sigma$ дает нам основание говорить об эффективности использования выражения (12) для этих целей.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Kirkwood J. G.//J. Chem. Phys. 1935. **3**. P. 300.
[2] Nijboer B. R., Van Hove L.//Phys. Rev. 1952. **85**, N 5. P. 777.
[3] Ree F. H., Keeler R. N., McCartny S. Y.//J. Chem. Phys. 1966. **44**, N 9. P. 3407.
[4] Базаров И. П., Николаев П. Н.//ДАН СССР. 1987. **296**, № 2. С. 321.
[5] Kratky K. W.//Physica A. 1977. **87**, N 3. P. 584.

Поступила в редакцию
04.04.94