

кривизну в меридиональном направлении. Если отношения $s_{10} = c_1''/c_1', s_{20} = c_2''/c_2', s_{30} = c_3''/c_3'$ очень велики, для вычисления констант теории качения можно использовать зависимости (1) ... (6), (14), приведенные в работе [2] и соответствующие модели II (см. рис. 1).

ЛИТЕРАТУРА

1. Бидерман В.Л., Левковская Э.Я. Расчет напряжений и деформаций, вызываемых давлением в шинах типа P // Изв. вузов. Сер. Машиностроение. — 1969. — № 3. — С. 107–112.
2. Левин М.А. Определение констант теории качения на основе модельного подхода и базовых параметров деформируемого колеса // Теорет. и прикл. механика. — Мн., 1987. — Вып. 14. — С3–10.
3. Левин М.А. Исследование нестационарного увода шины с учетом жесткости протектора // Изв. АН БССР. Сер. физ.-техн. наук. — 1973. — № 4. — С. 112–118.
4. Clark S. Mechanics of pneumatic tires. — Washington, 1971. — P. 698.

УДК 531.19

В.С. ВИХРЕНКО, Г.В. КОМАРОВ

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПОТЕНЦИАЛОВ СРЕДНИХ СИЛ В МЕТОДЕ УСЛОВНЫХ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ НА ОСНОВЕ КУМУЛЯНТНЫХ РАЗЛОЖЕНИЙ ИНТЕГРАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

Разработка эффективных подходов к решению системы интегральных уравнений [1]

$$e^{-\beta\varphi_{ij}(\vec{q}_i)} = \frac{\int_{V_j} e^{-\beta[\Phi_{ij}(|\vec{q}_i - \vec{q}_j + \vec{R}_{jj}|) - \varphi_{ij}(\vec{q}_j)] - \beta\varphi_j(\vec{q}_j)} d\vec{q}_j}{\int_{V_j} e^{-\beta\varphi_j(\vec{q}_j)} d\vec{q}_j} \quad (1)$$

относительно потенциалов средних сил $\varphi_{ij}(\vec{q}_i)$ имеет важное значение как для получения данных в широкой области изменения термодинамических параметров системы, так и для изучения соответствия рассматриваемого метода другим теориям, в частности динамической теории кристаллической решетки. В системе уравнений (1) $\beta = (k_B T)^{-1}$ — обратная температура; V_j — объемы ячеек, на которые разбит весь объем системы; q_j — координата частицы, находящейся в j -й ячейке ($\vec{q}_j \in V_j$), отсчитываемая от центра ячейки; Φ_{ij} — парный межчастичный потенциал; R_{jj} — радиус-вектор, соединяющий центры i -й и j -й ячеек.

Рассматривая кристаллическое состояние вещества, когда движение частиц ограничено окрестностями узлов кристаллической решетки, представим потенциал межчастичного взаимодействия в виде ряда

$$\Phi_{ij} = \Phi_{ij}^{(0)} + \vec{\Phi}_{ij}^{(1)} \cdot (\vec{q}_i - \vec{q}_j) + \frac{1}{2} \hat{\Phi}_{ij}^{(2)} \cdot (\vec{q}_i - \vec{q}_j)^2 + \dots, \quad (2)$$

где тензорные коэффициенты разложения $\Phi_{ij}^{(0)}$, $\vec{\Phi}_{ij}^{(1)}$, $\hat{\Phi}_{ij}^{(2)}$, ... определяются производными потенциала по координате i -й частицы, вычисленными при значении аргумента, равном радиусу-вектору \vec{R}_{ij} , соединяющему соответствующие узлы решетки. Для сокращения записей степени векторов будем понимать как тензоры соответствующего ранга, а точка между тензорами означает свертку по такому количеству индексов, чтобы тензорная размерность всех слагаемых была одинаковой.

Для потенциалов средних сил используем представление

$$\left. \begin{aligned} \varphi_{ij}(\vec{q}_i) &= \Phi_{ij}(|\vec{R}_{ij} + \vec{q}_i|) + \psi_{ij}(\vec{q}_i); \\ \varphi_{ji}(\vec{q}_j) &= \Phi_{ij}(|\vec{R}_{ij} + \vec{q}_j|) + \psi_{ji}(\vec{q}_j) \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

и разложим потенциалы φ и ψ в ряды аналогично ряду (2). Тогда система интегральных уравнений (1) может быть переписана относительно потенциалов ψ :

$$\begin{aligned} c^{-3/2} \det \|\hat{\kappa}\| \langle \exp(-\beta X) \rangle_{(0)} \exp(-\beta \psi_{ij}(\vec{q}_i)) = \\ = \langle \exp(-\beta Y) \rangle \exp \left\{ \beta \left[\Phi_{ij}^{(0)} + \psi_{ji}^{(0)} + \frac{1}{2} \hat{\kappa} \cdot (\hat{a} \cdot \vec{q}_i + \vec{\gamma}) \right] \right\}. \quad (4) \end{aligned}$$

Угловые скобки в правой части обозначают усреднение по \vec{q}_j с помощью нормированной на единицу функции распределения

$$\left(\frac{\beta}{2\pi} \right)^{3/2} \det^{1/2} \|\hat{\kappa}\| \exp \left[-\frac{1}{2} \beta \hat{\kappa} \cdot (\vec{q}_j - \hat{a} \cdot \vec{q}_j - \vec{\gamma})^2 \right], \quad (5)$$

где

$$\left. \begin{aligned} \hat{\kappa} &= c\hat{E} - \hat{\psi}_{ij}^{(2)}; \quad c\hat{E} = \sum_{j \neq i} \hat{\varphi}_{ij}^{(2)} = \hat{\varphi}_i^{(2)}; \\ \hat{a} &= \hat{\kappa}^{-1} \cdot \hat{\Phi}_{ij}^{(2)}; \quad \vec{\gamma} = \hat{\kappa}^{-1} \cdot \vec{\psi}_{ji}^{(1)}. \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

Гауссова функция (5) получена путем выделения полного квадрата из линейных и квадратичных членов в показателе экспоненты подынтегрального выражения числителя в уравнении (1). Эта функция формально совпадает с полученной ранее [2] в гармоническом приближении, но имеет то существенное отличие, что параметры c , $\vec{\psi}_{ij}^{(1)}$ и $\hat{\psi}_{ij}^{(2)}$ определяются из решения системы уравнений (4). В левой части усреднение производится с помощью более простой функции

$$\left(\frac{\beta c}{2\pi} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{1}{2} \beta c q_j^2 \right). \quad (7)$$

Поскольку низшие слагаемые разложений потенциалов вошли в гауссовы функции, величины X и Y будут содержать производные потенциалов третьего и более высоких порядков. Запишем явные выражения для них:

$$X = \frac{1}{4!} \hat{\varphi}_j^{(4)} \cdot \vec{q}_j^{(4)} + \frac{1}{6!} \hat{\varphi}_j^{(6)} \cdot \vec{q}_j^{(6)} + \dots, \quad (8)$$

$$Y = \frac{1}{3!} \hat{\Phi}_{ij}^{(3)} \cdot (-3 \vec{q}_j \vec{q}_i \vec{q}_i + 3 \vec{q}_j \vec{q}_j \vec{q}_i) + \\ + \frac{1}{4!} \hat{\Phi}_{ij}^{(4)} \cdot (-4 \vec{q}_j \vec{q}_i^3 + 6 \vec{q}_j^2 \vec{q}_i^2 - 4 \vec{q}_j^3 \vec{q}_i) - \\ - \frac{1}{3!} \hat{\Psi}_{ji}^{(3)} \cdot \vec{q}_j^3 + \frac{1}{4!} (\hat{\varphi}_j^{(4)} - \hat{\psi}_{ji}^{(4)}) \cdot \vec{q}_j^4 + \dots \quad (9)$$

Переопределение потенциалов средних сил, согласно уравнениям (3), позволило исключить в выражении (9) из разложения парного потенциала Φ слагаемые, в которые входят степени только \vec{q}_j или только \vec{q}_i . Кроме того, в выражениях (8) и (9) ввиду свойств симметрии отсутствуют нечетные производные потенциала φ_j .

Поскольку искомая функция в уравнении (4) входит в показатель экспоненты, удобно результаты усреднения представить в виде кумулянтных разложений [4], представляющих просуммированные ряды обычных разложений

$$\langle \exp(-\beta Y) \rangle = \exp \left[-\beta \langle Y \rangle + \frac{1}{2!} \beta^2 \langle Y, Y \rangle - \dots \right].$$

Кумулянты определяются через обычные средние значения

$$\langle Y, Y \rangle = \langle Y^2 \rangle - \langle Y \rangle^2,$$

$$\langle Y, Y, Y \rangle = \langle Y^3 \rangle - 3 \langle Y^2 \rangle \langle Y \rangle + 2 \langle Y^3 \rangle.$$

На основании уравнения (4) находим

$$\psi_{ij}(\vec{q}_i) = -\Phi_{ij}^{(0)} - \psi_{ij}^{(0)} - \frac{1}{2} \hat{\kappa} \cdot (\hat{a} \cdot \vec{q}_i + \vec{\gamma})^2 - \\ - \frac{1}{2} \beta^{-1} \ln(c^3 / \det \|\hat{\kappa}\|) - \langle X \rangle_{(0)} + \frac{1}{2} \beta \langle X, X \rangle_{(0)} + \\ + \langle Y \rangle - \frac{1}{2} \beta \langle Y, Y \rangle + \dots \quad (10)$$

Представляя теперь $\psi_{ij}(\vec{q}_i)$ в виде ряда

$$\psi_{ij}(\vec{q}_i) = \psi_{ij}^{(0)} + \vec{\psi}_{ij}^{(1)} \cdot \vec{q}_i + \frac{1}{2} \hat{\psi}_{ij}^{(2)} \cdot \vec{q}_i^2 + \dots,$$

вычисляя кумулянты и приравнявая коэффициенты при одинаковых степенях \vec{q}_i , получим систему нелинейных уравнений относительно $\vec{\psi}_{ij}^{(1)}, \hat{\psi}_{ij}^{(2)}, \dots$

Следует подчеркнуть, что поскольку усреднение выполняется по Гауссовому распределению, кумулянты третьего и более высоких порядков от \vec{q}_i равны нулю [3]. Это позволяет выразить средние значения любых степеней \vec{q}_i через кумулянты первого и второго порядка. Например, $\langle \vec{q}_i^3 \rangle = 3 \langle \vec{q}_i, \vec{q}_i \rangle + \langle \vec{q}_i \rangle^3$, $\langle \vec{q}_i^4 \rangle = 3 \langle \vec{q}_i, \vec{q}_i \rangle^2 + 6 \langle \vec{q}_i, \vec{q}_i \rangle \langle \vec{q}_i \rangle^2 + \langle \vec{q}_i \rangle^4$.

Далее учтем, что в соответствии с (5), (6)

$$\langle \vec{q}_i \rangle = \hat{\alpha} \cdot \vec{q}_i + \vec{\gamma}, \quad \langle \vec{q}_i, \vec{q}_i \rangle = \beta^{-1} \hat{\kappa}^{-1};$$

и в соответствии с (7)

$$\langle \vec{q}_i \rangle_{(0)} = 0, \quad \langle \vec{q}_i, \vec{q}_i \rangle_{(0)} = (\beta c)^{-1} \hat{E},$$

где \hat{E} — единичный тензор.

Рассматривая кристаллы, обладающие центром симметрии, для коэффициентов разложения потенциалов средних сил запишем условия

$$\hat{\psi}_{ij}^{(k)} = \pm \hat{\psi}_{ij}^{(k)},$$

где верхний знак соответствует четным k , нижний — нечетным.

Ограничимся учетом лишь первых кумулянт $\langle X \rangle_{(0)}$ и $\langle Y \rangle$ в системе уравнений (10). Приравнявая коэффициенты при одинаковых степенях \vec{q}_i , приходим к системе уравнений (ограничимся учетом в потенциале взаимодействия Φ ангармонических членов третьего и четвертого порядков):

$$\left\{ \begin{aligned} \psi_{ij}^{(0)} &= -\frac{1}{2} \Phi_{ij}^{(0)} - \frac{\beta^{-1}}{4} \ln \frac{c^3}{\det \|\hat{\kappa}\|} - \frac{1}{4} \vec{\psi}_{ij}^{(1)} \cdot \hat{\kappa}^{-1} \cdot \vec{\psi}_{ij}^{(1)} + \\ &+ \frac{1}{12} \hat{\psi}_{ij}^{(3)} \cdot (3\beta^{-1} \hat{\kappa}^{-1} + \vec{\gamma}^2) \vec{\gamma} - \frac{1}{48} \hat{\psi}_{ij}^{(4)} \cdot (3\beta^{-2} \hat{\kappa}^{-2} + 6\beta^{-1} \hat{\kappa}^{-1} \vec{\gamma}^2 + \\ &+ \vec{\gamma}^4) + \frac{1}{48} \hat{\varphi}_i^{(4)} \cdot [3\beta^{-2} (\hat{\kappa}^{-2} - c^{-2} \hat{E} \hat{E}) + 6\beta^{-1} \hat{\kappa}^{-1} \vec{\gamma}^2 + \vec{\gamma}^4]; \\ (\hat{E} - \hat{\alpha}) \cdot \vec{\psi}_{ij}^{(1)} &= \frac{1}{2} \hat{\Phi}_{ij}^{(3)} \cdot \beta^{-1} \hat{\kappa}^{-1} - \frac{1}{6} \hat{\Phi}_{ij}^{(4)} \cdot (3\beta^{-1} \hat{\kappa}^{-1} + \vec{\gamma}^2) \vec{\gamma} + \\ &+ \frac{1}{2} \hat{\psi}_{ij}^{(3)} \cdot (\beta^{-1} \hat{\kappa}^{-1} + \vec{\gamma}^2) \hat{\alpha}_* + \frac{1}{6} (\hat{\varphi}_i^{(4)} - \hat{\psi}_{ij}^{(4)}) \cdot (3\beta^{-1} \hat{\kappa}^{-1} + \\ &+ \vec{\gamma}^2) \vec{\gamma} \hat{\alpha}_*; \\ \hat{\psi}_{ij}^{(2)} &= -\hat{\Phi}_{ij}^{(2)} \cdot \hat{\kappa}^{-1} \cdot \hat{\Phi}_{ij}^{(2)} + 2 \hat{\Phi}_{ij*}^{(3)} \cdot \vec{\gamma} \hat{\alpha}_* - \hat{\Phi}_{ij}^{(3)} \cdot \vec{\gamma} - \\ &- \hat{\Phi}_{ij*}^{(4)} \cdot (\beta^{-1} \hat{\kappa}^{-1} + \vec{\gamma}^2) \hat{\alpha}_* + \frac{1}{2} \hat{\Phi}_{ij}^{(4)} \cdot (\beta^{-1} \hat{\kappa}^{-1} + \vec{\gamma}^2) + \\ &+ \hat{\psi}_{ij}^{(3)} \cdot \vec{\gamma} \hat{\alpha}_* \hat{\alpha}_* + \frac{1}{2} (\hat{\varphi}_i^{(4)} - \hat{\psi}_{ij}^{(4)}) \cdot (\beta^{-1} \hat{\kappa}^{-1} + \vec{\gamma}^2) \hat{\alpha}_* \hat{\alpha}_*; \end{aligned} \right. \quad (11)$$

$$\begin{aligned}
 & (\hat{E}_* \hat{E}_* \hat{E}_* - \hat{a}_* \hat{a}_* \hat{a}_*) \cdot \hat{\psi}_{ij}^{(3)} = 3 \hat{\Phi}_{ij*}^{(3)} \cdot \hat{a}_* \hat{a}_* - 3 \hat{\Phi}_{ij**}^{(3)} \cdot \hat{a}_* - \\
 & - 3 \hat{\Phi}_{ij**}^{(4)} \cdot \vec{\gamma} \hat{a}_* \hat{a}_* + 3 \hat{\Phi}_{ij**}^{(4)} \cdot \vec{\gamma} \hat{a}_* - \hat{\Phi}_{ij}^{(4)} \cdot \vec{\gamma} + (\hat{\varphi}_i^{(4)} - \hat{\psi}_{ij}^{(4)}) \times \\
 & \times \vec{\gamma} \hat{a}_* \hat{a}_* \hat{a}_* ; \\
 & (\hat{E}_* \hat{E}_* \hat{E}_* \hat{E}_* + \hat{a}_* \hat{a}_* \hat{a}_* \hat{a}_*) \cdot \hat{\psi}_{ij}^{(4)} = -4 \hat{\Phi}_{ij***}^{(4)} \cdot \hat{a}_* + \\
 & + 6 \hat{\Phi}_{ij**}^{(4)} \cdot \hat{a}_* \hat{a}_* - 4 \hat{\Phi}_{ij*}^{(4)} \cdot \hat{a}_* \hat{a}_* \hat{a}_* + \hat{\varphi}_j^{(4)} \cdot \hat{a}_* \hat{a}_* \hat{a}_* .
 \end{aligned}$$

Звездочки отмечают количество тензорных индексов, остающихся свободными после свертки.

В гармоническом приближении, когда $\hat{\Phi}^{(3)} = 0$ и $\hat{\Phi}^{(4)} = 0$, все $\hat{\psi}$ (за исключением $\hat{\psi}^{(2)}$) равны нулю и из уравнений (11) следуют результаты работы [2].

Для сопоставления с результатами динамической теории определим низкотемпературные (с точностью до $\beta^{-1} = k_B T$, а в $\psi_{ij}^{(0)}$ — до β^{-2}) ангармонические поправки в свободной энергии и факторе Дебая–Валлера. При этом учтем, что разложения $\vec{\psi}_{ij}^{(1)}$ и $\vec{\gamma}$ начинаются с членов порядка β^{-1} . Ограничимся учетом взаимодействия ближайших соседей. Рассматривая состояния кристалла, соответствующие точкам, близким к линии плавления, примем для оценок обычно используемые [5] приближения

$$\begin{aligned}
 \vec{\Phi}_{ij}^{(1)} &= 0, \quad \hat{\Phi}_{ij}^{(2)} = \Phi_2 \vec{n} \vec{n}, \\
 \hat{\Phi}_{ij}^{(3)} &= \Phi_3 \vec{n} \vec{n} \vec{n}, \quad \hat{\Phi}_{ij}^{(4)} = \hat{\Phi}_4 \vec{n} \vec{n} \vec{n} \vec{n},
 \end{aligned}$$

где $\vec{n} = \vec{R}_{ij} / R$ — единичный вектор, соединяющий два ближайших узла кристаллической решетки.

В нулевом по $k_B T$ приближении из системы (11) находим (индексы ij опускаем, поскольку речь идет о ближайших соседях) $\vec{\psi}_0^{(1)} = 0$, $\vec{\gamma}_0 = 0$, $\hat{\psi}_0^{(2)} = \psi_0^{(2)} \vec{n} \vec{n}$, $\psi_0^{(2)} = -\Phi_3/2$, $c_0 = \frac{8}{3} \Phi_2$, $\hat{\kappa}_0 = \frac{8}{3} \Phi_2 (\hat{E} + \frac{1}{8} \vec{n} \vec{n})$, $\hat{a}_0 = \frac{1}{3} \vec{n} \vec{n}$, $\hat{\kappa}_0^{-1} = \frac{3}{8\Phi_2} (\hat{E} - \frac{1}{9} \vec{n} \vec{n})$, $\psi_0^{(3)} = -\frac{9}{13} \Phi_3$, $\psi_0^{(4)} = -0,8 \Phi_4$.

В этом приближении выражение для свободной энергии было исследовано в [1, 2], а для фактора Дебая–Валлера W , определяемого соотношением $\overline{\vec{q}_i \vec{q}_i} = W \hat{E}$ (черта над символами координат — усреднение по равновесной функции распределения), в гармоническом приближении находим

$$W_0 = (\beta c_0)^{-1} = 0,375 k_B T / \Phi_2, \quad (12)$$

что близко к точному значению $W_0 = 0,419 k_B T / \Phi_2$ [5]. Отметим, что без уче-

та корреляции между положениями частиц $W_0 = 0,25 (k_B T / \Phi_2)$, что значительно хуже (12).

Анализируя слагаемые первого порядка по температуре, выделим сперва линейные слагаемые в выражениях для $\hat{\kappa}$ и $\hat{\kappa}^{-1}$: $\hat{\kappa} = c\hat{E} - \hat{\psi}_{ij}^{(2)} \equiv 4 (\Phi_2 + \psi_2) \hat{E} - \psi_2 \vec{n} \vec{n} = \hat{\kappa}_0 + \psi_{2\theta} (4\hat{E} - \vec{n} \vec{n})$, $\hat{\kappa}^{-1} = \hat{\kappa}_0^{-1} - \frac{9}{16} \frac{\psi_{2\theta}}{\Phi_2^2} (\hat{E} - \frac{11}{27} \vec{n} \vec{n})$.

Здесь нижним индексом θ обозначены величины первого порядка по $\theta = k_B T$. Далее вычислим линейные по θ слагаемые в $\psi^{(1)}$, $\psi^{(2)}$ и квадратичные в $\psi^{(0)}$. После несложных вычислений, согласно системе уравнений (11), находим:

$$\left. \begin{aligned} \psi_{\theta}^{(1)} &= \frac{5}{26} \frac{\Phi_3}{\Phi_2} \beta^{-1}; \quad \gamma_{\theta} = -\frac{5}{78} \frac{\Phi_3}{\Phi_2^2} \beta^{-1}; \\ \psi_{\theta}^{(2)} &= (0,040 \frac{\Phi_3^2}{\Phi_2^2} + 0,119 \frac{\Phi_4}{\Phi_2}) \beta^{-1}; \\ \psi_{\theta^2}^{(0)} &= -(0,00494 \frac{\Phi_3^2}{\Phi_2^3} + 0,01274 \frac{\Phi_4}{\Phi_2^2}) \beta^{-2}, \end{aligned} \right\} \quad (13)$$

Ангармонические поправки в факторе Дебая–Валлера и в выражении для свободной энергии, согласно соотношениям (13):

$$\left. \begin{aligned} W_{\theta^2} &= -4\beta^{-1} \psi_{\theta}^{(2)} / c_0^2 = -(0,0225 \frac{\Phi_3^2}{\Phi_2^3} + 0,0672 \frac{\Phi_4}{\Phi_2^2}) \beta^{-2}; \\ f_{\theta^2} &= (0,0296 \frac{\Phi_3^2}{\Phi_2^3} + 0,1579 \frac{\Phi_4}{\Phi_2^2}) \beta^{-2}, \end{aligned} \right\} \quad (14)$$

В соотношениях (14) вклад ангармонических членов четвертого порядка несколько отличается по величине, а члены третьего порядка имеют противоположный знак по сравнению с найденным в [5, 6]. Это и понятно, поскольку сама структура кумулянта второго порядка указывает, что его вклад в ангармонические эффекты существен.

Предложенная процедура после определения параметров $\vec{\psi}_{ij}^{(1)}$, $\hat{\psi}_{ij}^{(2)}$ может быть использована для нахождения функциональной зависимости потенциала $\varphi_{ij}(\vec{q}_i)$. При этом не требуется разложения межчастичного потенциала Φ в уравнении (1) по координатам i -й частицы. Разложение по температуре в свою очередь удобно использовать для построения устойчивой итерационной схемы решения системы уравнений типа (11).

ЛИТЕРАТУРА

1. Ротт Л.А. Статистическая теория конденсированных систем. — М., 1979. — 280 с.
2. Брук-Левинсон Э.Т. Межчастичные корреляции в кристалле // Докл. АН БССР. — 1977. — Т. 21, № 6. — С. 511–514.
3. Стратонович Р.Л. Нелинейная неравновесная термодинамика. — М., 1985. — 480 с.
4. Кубо Р. Generalized Cumulant Expansion Me-

thod // J. Phys. Soc. Japan. — 1962. — V. 17, No. 7. — P. 1100—1120. 5. Maradudin A.A., Flinn P.A. Anharmonic Contributions to the Debye — Waller Factor // Phys. Rev. — 1962. — V. 129, No. 6. — P. 2529—2547. 6. Maradudin A.A., Flinn P.A., Coldwell-Horsfall R.A. Anharmonic Contributions to Vibrational Thermodynamic Properties of Solids. Part II: The High Temperature Limit // Annals of Phys. — 1961. — V. 15, No. 3. — P. 360—386.

УДК 531.19

В.С. ВИХРЕНКО

ВЛИЯНИЕ МЕЖЧАСТИЧНЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ НА ПОТЕНЦИАЛЫ СРЕДНИХ СИЛ В МЕТОДЕ УСЛОВНЫХ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ

Корреляции в положениях частиц твердого тела играют исключительную роль в формировании его физико-механических свойств и определяют само существование твердого тела. Поэтому важное значение имеет разработка методов учета этих корреляций. Неоднократно отмечалось, что уравнения метода условных распределений [1] дают основу для последовательного учета корреляций.

Полный учет межчастичных корреляций численным решением системы интегральных уравнений относительно потенциалов средних сил [1, 2, 7] связан со значительными трудностями, и поэтому при рассмотрении кристаллического состояния вещества в ряде случаев можно воспользоваться малостью среднеквадратических отклонений частиц от узлов кристаллической решетки [3—5]. Однако построение приближенного решения интегральных уравнений путем выделения центрально-симметричной одночастичной функции распределения в качестве функции с резким максимумом и ограничения первым (квадратичным) слагаемым [4, 5] уравнения метода Лапласа существенно подавляет влияние межчастичных корреляций на потенциал средней силы.

Для устранения отмеченного недостатка выберем, как и в работе [6] (ниже сохраним обозначения, используемые в этой работе), в качестве базисных две нормированных на единицу гауссовых функции распределения

$$F_1(\vec{q}_i) = [\beta c / (2\pi)]^{3/2} \exp(-\beta c q_i^2 / 2), \quad (1)$$

$$F_2(\vec{q}_i, \vec{q}_j) = \left(\frac{\beta}{2\pi}\right)^{3/2} \det^{1/2} \|\hat{k}\| \exp\left[-\frac{1}{2} \beta \hat{k} \cdot (\vec{q}_j - \hat{\alpha} \vec{q}_i - \vec{\gamma})^2\right] \quad (2)$$

и введем переопределенные потенциалы

$$\begin{aligned} \hat{\Phi}_{ij}(\vec{q}_i, \vec{q}_j) &= \Phi_{ij}(|\vec{q}_i + \vec{R}_{ij} - \vec{q}_j|) - \Phi_{ij}(|\vec{R}_{ij} + \vec{q}_i|) - \\ &- \Phi_{ij}(|\vec{q}_j - \vec{R}_{ij}|) + \Phi_{ij}(R_{ij}) - \hat{\Phi}_{ij}^{(2)} \cdot \vec{q}_i \vec{q}_j, \quad \tilde{\Psi}_{ij}(\vec{q}_j) = \psi_{ij}(\vec{q}_j) - \\ &- \psi_{ij}^{(0)} - \tilde{\psi}_{ij}^{(1)} \cdot \vec{q}_j - \frac{1}{2} \hat{\psi}_{ij}^{(2)} \cdot \vec{q}_j^2. \end{aligned}$$

Потенциалы ψ_{ij} определены уравнениями (3) работы [6], $\beta = (k_B T)^{-1}$ — обратная температура.