

ОПИСАНИЕ ДИНАМИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ МОЛЕКУЛЯРНОГО КРИСТАЛЛА С УЧЕТОМ СИЛЬНОЙ АНГАРМОНИЧНОСТИ МЕЖЧАСТИЧНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Изучение динамического поведения систем многих частиц методами статистической механики позволяет получить в настоящее время наиболее полную информацию об их корреляционных и спектральных свойствах. В рамках статистического метода условных распределений [1] в [2, 3] была получена замкнутая система уравнений относительно приведенных динамических функций, описывающая динамическое поведение молекулярной системы в терминах временных корреляционных функций координат и импульсов частиц. Замыкание бесконечной цепочки уравнений для приведенных динамических функций основано на выделении с помощью специально сконструированного группового разложения [2] корреляционных добавок к многочастичным функциям и последующего разложения добавок в ряд по тензорным полиномам Эрмита. В первом приближении теории раскладывались в ряд двухчастичные корреляционные добавки [4]. С целью понижения размерности задачи в [4] произведена редукция от системы уравнений в частных производных для корреляционных добавок к системе обыкновенных дифференциальных уравнений для коэффициентов разложения корреляционных добавок в ряд по тензорным полиномам Эрмита в импульсном пространстве и специальным ортогональным полиномам в конфигурационном пространстве.

Использование свойств симметрии гранецентрированной решетки при изучении поведения системы частиц, равновесные положения которых соответствуют узлам кристаллической решетки, а также переход от тензоров второго ранга к системе скалярных инвариантов, позволили более чем на два порядка сократить число интегрируемых дифференциальных уравнений движения [5].

В [6] развитая теория использована для изучения динамических свойств несовершенного кристалла при наличии в нем примесей замещения.

Настоящая работа посвящена выяснению роли второго приближения теории в описании динамического поведения совершенного кристалла. Как будет показано ниже, второе приближение оказывается существенным вблизи линии плавления, где в значительной мере сказывается ангармонизм межчастичного взаимодействия.

Система уравнений для коэффициентов разложения по полиномам во втором приближении получена в [7]:

$$\ddot{\varphi}_{(0)}^{(\alpha\beta)}(i; t) + \omega^2 \varphi_{(0)}^{(\alpha\beta)} = \sum_{j \neq i}^{12} \langle G_{ij}^{\beta\gamma} \rangle \varphi_{(0)}^{(\alpha\gamma)}(j; t) + \\ + \frac{1}{6} \sum_{j \neq i}^{12} \langle G_{ij}^{\beta\gamma} \xi_j \rangle \varphi_{(0)}^{(\alpha\gamma)}(j; t); \quad (1)$$

$$\ddot{\varphi}_{(a)}^{(\beta\xi)}(i;t) + \frac{1}{\sigma^2} w_{a\beta}^{\nu\gamma} \varphi_{(\nu)}^{(\gamma\xi)}(i;t) = \frac{1}{\sigma} \sum_{j \neq i}^{12} \langle G_{ij}^{\beta\gamma} q_i^\alpha \rangle \varphi_{(0)}^{(\gamma\xi)}(j;t) + \frac{1}{\sigma^2} \sum_{j \neq i}^{12} \langle G_{ij}^{\beta\gamma} q_i^\alpha q_j^\nu \rangle \varphi_{(\nu)}^{(\gamma\xi)}(j;t), \quad (2)$$

где

$$w_{a\beta}^{\nu\gamma} = \sum_{j \neq i}^{12} [\langle G_{ij}^\alpha q_i^\nu \rangle \delta_{\beta\gamma} + 2 \langle G_{ij}^\beta q_i^\nu \rangle \delta_{a\gamma} + \langle G_{ij}^{\beta\gamma} q_i^\alpha q_i^\nu \rangle]; \quad (3)$$

$$\omega^2 = \frac{1}{3\theta} \sum_{j \neq i}^{12} [\langle \Delta G_{ij}^\gamma \Delta G_{ij}^\nu \rangle + \langle F_1^\gamma F_{1j}^\nu \rangle] \delta_{\gamma\nu} = \frac{1}{3\theta} \sum_{j \neq i}^{12} \langle G_{ij}^{\nu\nu} \rangle \quad (4)$$

Здесь $\varphi_{(0)}^{(\alpha\beta)}(i;t)$, $\varphi_{(a)}^{(\beta\xi)}(i;t)$ – коэффициенты разложения по полиномам, верхние индексы соответствуют разложению в импульсном пространстве,

нижние – в конфигурационном; $G_{ij}^\alpha = -\frac{\partial\phi(|\vec{q}_i - \vec{q}_j|)}{\partial q_i^\alpha}$ – точечная сила,

действующая со стороны частицы j на частицу i ; $\Delta G_{ij}^\alpha = G_{ij}^\alpha - F_{ij}^\alpha$; $G_{ij}^{\alpha\beta} = \frac{\partial G_{ij}^\alpha}{\partial q_i^\beta} = -\frac{\partial^2\phi}{\partial q_i^\alpha \partial q_i^\beta}$; $F_{ij}^\alpha(\vec{q}_i) = \int_{V_j} G_{ij}^\alpha F_{11}^{(1)}(j/i) d\vec{q}_j$ – средняя сила, действующая на i час-

тицу со стороны j ; $F_{11}^{(1)}(j/i)$ – дважды условная равновесная функция условных распределений [1]; $F_i^\alpha = \sum_{j \neq i}^{12} F_{ij}^\alpha$; $\sigma^2 = \frac{1}{3} \langle q^2 \rangle$, $\langle q^2 \rangle$ – средний квадрат смещения частицы из равновесного положения; угловые скобки $\langle \dots \rangle$

означают усреднение с помощью одно- и двухчастичных равновесных функций условных распределений; латинские индексы указывают номера частиц, а греческие – компоненты векторов и тензоров.

Учитывая симметрию гранецентрированной кубической решетки, тензоры второго ранга $\varphi_{(0)}^{(\alpha\beta)}(i;t)$, $\varphi_{(0)}^{(\alpha\gamma)}(j;t)$, $\langle G_{ij}^{\alpha\beta} \rangle$ и тензоры третьего ранга $\langle G_{ij}^{\beta\gamma} q_j^\xi \rangle$, $\varphi_{(0)}^{(\alpha\gamma)}(j;t)$ можно представить следующим набором компонентов:

$$\varphi_{(0)}^{(\alpha\beta)}(i;t) = \beta_i^E \delta_{\alpha\beta} + \beta_i^n n_{0i}^\alpha n_{0i}^\beta; \quad (5)$$

$$\varphi_{(0)}^{(\alpha\gamma)}(j;t) = \beta_j^E \delta_{\alpha\gamma} + \beta_j^n n_{0j}^\alpha n_{0j}^\gamma; \quad (6)$$

$$\langle G_{ij}^{\beta\gamma} \rangle = \tilde{C}^E \delta_{\alpha\gamma} + \tilde{C}^n n_{ij}^\beta n_{ij}^\gamma; \quad (7)$$

$$\varphi_{(0)}^{(\alpha\gamma)}(j;t) = f_1 \delta_{\alpha\gamma} n_{0j}^\xi + f_2 \delta_{\alpha\xi} n_{0j}^\gamma + f_3 \delta_{\xi\gamma} n_{0j}^\alpha + f_4 n_{0j}^\alpha n_{0j}^\gamma n_{0j}^\xi; \quad (8)$$

$$\langle G_{ij}^{\beta\gamma} q_j^\xi \rangle = b_1 \delta_{\beta\gamma} n_{ij}^\xi + b_2 (\delta_{\gamma\xi} n_{ij}^\beta + \delta_{\beta\xi} n_{ij}^\gamma) + b_4 n_{ji}^\beta n_{ji}^\gamma n_{ji}^\xi, \quad (9)$$

где n_{ij}^α – единичный вектор вдоль направления, соединяющего центры i и j ячеек.

Подставляя (5) – (9) в (1) и произведя двойную свертку с $\delta_{\alpha\beta}$ и $n_{0i}^\alpha n_{0i}^\beta$, получим систему уравнений для компонент тензора $\varphi_{(0)}^{(\alpha\beta)}$:

$$\begin{aligned} \ddot{\beta}_i^E + \omega^2 \beta_i^E = & \sum_{j \neq i}^{12} \left\{ \beta_j^E \left[\tilde{C}^E + \frac{\tilde{C}^n}{2} (1 - U_B^2) \right] + \frac{\beta_j^n}{2} \left[\tilde{C}^E (1 - U_A^2) - \tilde{C}^n U_C (U_A U_B - \right. \right. \\ & \left. \left. - U_C) \right] \right\} + \frac{1}{2\sigma} \sum_{j \neq i}^{12} \left\{ f_1 [-2b_1 U_C + 2b_2 (U_A U_B - U_C) + b_4 (U_B^2 - \right. \\ & \left. - 1) U_C] + f_2 [b_1 (U_A U_B - U_C) + b_2 (U_A U_B - 3U_C) + b_4 (U_B^2 - \right. \\ & \left. - 1) U_C] + f_3 [(b_1 + 4b_2 + b_4) (U_A U_B - U_C)] + \right. \\ & \left. + f_4 [b_1 (U_A^2 - 1) U_C + b_2 (U_A U_B + U_A^2 U_C - 2U_C) + b_4 (U_A U_B - \right. \\ & \left. - U_C) U_C^2] \right\}; \\ \ddot{\beta}_i^n + \omega^2 \beta_i^n = & \frac{1}{2} \sum_{j \neq i}^{12} \left\{ \beta_j^E \tilde{C}^n (3U_B^2 - 1) + [\tilde{C}^E (3U_A^2 - 1) - \tilde{C}^n U_C (U_C - \right. \\ & \left. - 3U_A U_B) \beta_j^n \right\} + \frac{1}{2\sigma} \sum_{j \neq i}^{12} \left\{ f_1 [2b_2 (U_C - 3U_A U_B) + b_4 (1 - 3U_B^2) U_C] + \right. \\ & \left. + f_2 [(b_1 + b_2) (U_C + 3U_A U_B) + b_4 (1 - 3U_B^2) U_C] + f_3 [(b_1 + 4b_2 + \right. \\ & \left. + b_4) (U_C - 3U_A U_B)] + f_4 [b_4 (1 - 3U_A^2) U_C + b_2 (2U_C - 3U_A U_B - \right. \\ & \left. - 3U_A^2 U_C) + b_4 (U_C - 3U_A U_B) U_C^2] \right\}. \end{aligned} \quad (10)$$

В (10) использованы обозначения $U_A \equiv \vec{n}_{0i} \cdot \vec{n}_{0j}$, $U_B \equiv \vec{n}_{0i} \cdot \vec{n}_{ij}$, $U_C \equiv \vec{n}_{0j} \cdot \vec{n}_{ij}$.

Для центральной частицы

$$\begin{aligned} \ddot{\beta}_0 + \omega^2 \beta_0 = & 4 \left[(3\tilde{C}^E + \tilde{C}^n) \beta_1^E + (\tilde{C}^E + \tilde{C}^n) \beta_1^n - \frac{4}{\sigma} [f_1 (3b_1 + \right. \\ & \left. + 2b_2 + b_4) + (f_2 + f_3) (b_1 + 4b_2 + b_4) + f_4 (b_1 + 2b_2 + b_4)] \right]. \end{aligned} \quad (11)$$

Тензорам, входящим в уравнение (2), соответствуют представления вида

$$\varphi_{(\alpha)}^{(\beta\xi)}(i; t) = f_1 \delta_{\beta\xi} n_{0i}^\alpha + f_2 \delta_{\beta\alpha} n_{0i}^\xi + f_3 \delta_{\alpha\xi} n_{0i}^\beta + f_4 n_{0i}^\alpha n_{0i}^\beta n_{0i}^\xi; \quad (12)$$

$$\varphi_{(\nu)}^{(\gamma\xi)}(i; t) = f_1 \delta_{\gamma\xi} n_{0i}^\nu + f_2 \delta_{\gamma\nu} n_{0i}^\xi + f_3 \delta_{\nu\xi} n_{0i}^\gamma + f_4 n_{0i}^\nu n_{0i}^\gamma n_{0i}^\xi; \quad (13)$$

$$w_{\alpha\beta}^{\nu\gamma} = \sigma^2 (\omega_1^2 \delta_{\alpha\beta} \delta_{\nu\gamma} + \omega_2^2 \delta_{\alpha\nu} \delta_{\beta\gamma} + \omega_3^2 \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\nu}); \quad (14)$$

$$\langle G_{ij}^{\beta\gamma} q_i^\alpha \rangle = b_1 \delta_{\beta\gamma} n_{ij}^\alpha + b_2 (\delta_{\alpha\beta} n_{ij}^\gamma + \delta_{\alpha\gamma} n_{ij}^\beta) + b_4 n_{ij}^\alpha n_{ij}^\beta n_{ij}^\gamma; \quad (15)$$

$$\langle G_{ij}^{\beta\gamma} q_i^\alpha q_j^\nu \rangle = e_1 n_{ij}^\alpha n_{ij}^\beta n_{ij}^\gamma n_{ij}^\nu. \quad (16)$$

Здесь пренебрегаем остальными компонентами тензора четвертого ранга ввиду их малости.

Подставив (12) – (16) в (2) и произведя тройную свертку с множителями при f_1, f_2, f_3, f_4 в (12), получим систему уравнений для скалярных инвариантов f :

$$\begin{aligned} \ddot{f}_1 + \frac{\omega_2^2}{\sigma^2} f_1 + \frac{\omega_3^2}{\sigma^2} f_3 &= \frac{1}{2\sigma} \sum_{j \neq i}^{12} \left\{ \beta_j^E [2b_1 U_B + b_4 U_B (1 - U_B^2)] + \right. \\ &+ \beta_j^n [b_1 U_B (1 - U_B^2) + (b_2 U_A + b_4 U_B U_C)(U_C - U_A U_B)] \left. \right\} + \\ &+ \frac{e_1}{2\sigma^2} \sum_{j \neq i}^{12} [(f_1 + f_3)(1 - U_B^2) U_B^2]; \\ \ddot{f}_2 + \frac{\omega_1^2}{\sigma^2} f_1 + \frac{3\omega_1^2 + \omega_2^2 + \omega_3^2}{\sigma^2} f_2 + \frac{\omega_2^2}{\sigma^2} f_3 + \frac{\omega_1^2}{\sigma^2} f_4 &= \\ &= \frac{1}{2\sigma} \sum_{j \neq i}^{12} \left\{ \beta_j^E U_B [2b_2 + b_4 (1 - U_B^2)] + \beta_j^n [(b_1 + b_2)(U_C - U_A U_B) + \right. \\ &+ b_4 (1 - U_B^2) U_C + 2b_2 U_C U_A] + \frac{e_1}{2\sigma^2} \sum_{j \neq i}^{12} \left\{ (1 - U_B^2) [(f_1 + f_3 + \right. \\ &+ f_4) U_B^2 + f_2] \left. \right\}; \\ \ddot{f}_3 + \frac{\omega_3^2}{\sigma^2} f_1 + \frac{\omega_2^2}{\sigma^2} f_3 &= \frac{1}{2\sigma} \sum_{j \neq i}^{12} \left\{ \beta_j^E U_B [2b_2 + b_4 (1 - U_B^2)] + \right. \\ &+ \beta_j^n [(b_1 U_A + b_4 U_B U_C)(U_C - U_A U_B) + b_2 U_B (1 - U_A^2)] \left. \right\} + \\ &+ \frac{e_1}{2\sigma^2} \sum_{j \neq i}^{12} [(f_1 + f_2)(1 - U_B^2) U_B^2]; \\ \ddot{f}_4 + \frac{\omega_2^2 + \omega_3^2}{\sigma^2} f_4 &= \frac{1}{\sigma} \sum_{j \neq i}^{12} \left\{ \beta_j^E [b_4 \frac{U_B}{2} (5U_B^2 - 3)] + \beta_j^n \left\{ b_1 \left[\frac{U_B}{2} (5U_A^2 - \right. \right. \right. \\ &- 1) - U_A U_C] + b_2 \left[\frac{U_B}{2} (5U_A^2 - 1) - U_A U_C] + b_4 U_C [(5U_B^2 - 1) \frac{U_A}{2} - \right. \\ &- U_B U_C] \left. \right\} \left. \right\} + \frac{e_1}{\sigma^2} \sum_{j \neq i}^{12} \left\{ \frac{3U_B^2 - 1}{2} [(f_1 + f_3 + f_4) U_B^2 + f_2] - (f_1 + \right. \\ &+ f_3)(1 - U_B^2) U_B^2 \left. \right\}. \end{aligned} \quad (17)$$

Для коэффициентов представлений (7), (14), (15), (16) необходимо получить явные выражения через потенциал межчастичного взаимодействия Φ .

Направляя ось Ox по вектору \vec{n}_{ij} (рис. 1), представим коэффициенты выражения (7) через вторые производные следующим образом:

$$\tilde{C}^E = \langle G_{ij}^{zz} \rangle, \quad \tilde{C}^n = \langle G_{ij}^{xx} \rangle - \langle G_{ij}^{zz} \rangle. \quad (18)$$

Для конкретных вычислений был использован потенциал Леннарда-Джонса в безразмерных переменных [1]

$$\Phi_{ij}(r_{ij}) = \frac{4}{r_{ij}^6} - \left(\frac{1}{r_{ij}^6} - 1 \right), \quad (19)$$

где

$$r_{ij}^2 = B^2 \left[\left(\frac{R_{ij}}{B} + \tilde{r}^j \eta^j - \tilde{r}^i \eta^i \right)^2 + (\tilde{r}^j \sqrt{1 - \eta_j^2} \cos \varphi^j)^2 + (\tilde{r}^j \sqrt{1 - \eta_j^2} \sin \varphi^j - \tilde{r}^i \sqrt{1 - \eta_i^2})^2 \right], \quad \eta = \cos \theta, \quad \tilde{r} = \frac{r}{B}.$$

Продифференцировав дважды потенциал (19) и произведя усреднение по углу нутации φ^i частицы i , получим:

$$\begin{aligned} \langle G_{ij}^{zz} \rangle &= \langle 24 \left\{ \left(\frac{7}{r_{ij}^6} - 2 \right) \frac{2}{r_{ij}^{10}} \left[r_j \sqrt{1 - \eta_j^2} \sin \varphi_j - r_i \sqrt{1 - \eta_i^2} \right]^2 + \right. \\ &+ \left. r_j^2 (1 - \eta_j^2) \cos^2 \varphi_j \right\} - \frac{1}{r_{ij}^8} \left(\frac{2}{r_{ij}^6} - 1 \right) \rangle; \\ \langle G_{ij}^{xx} \rangle &= \langle 24 \left\{ \left[\frac{4}{r_{ij}^{10}} \left(\frac{7}{r_{ij}^6} - 2 \right) (r_j \eta_j + b_{ij} - r_i \eta_i)^2 - \frac{1}{r_{ij}^8} \left(\frac{2}{r_{ij}^6} - 1 \right) \right] \right\} \rangle \end{aligned} \quad (20)$$

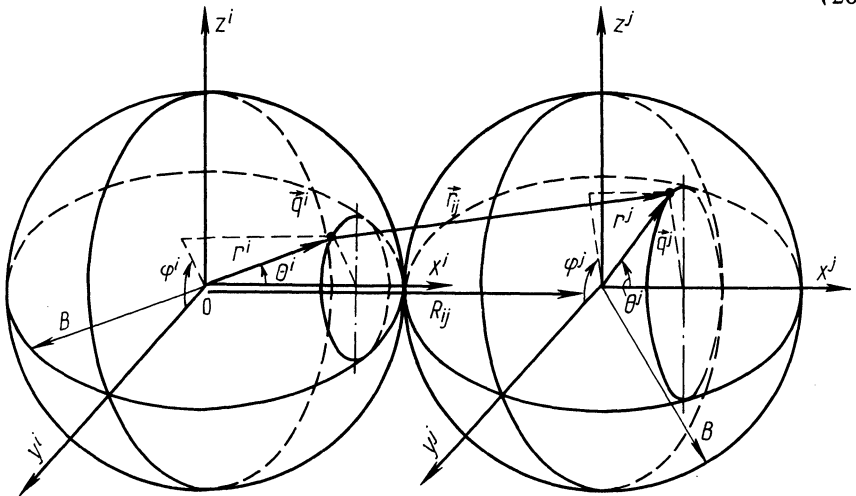


Рис. 1. Система координат для вычисления средних значений.

Коэффициенты (15) выражаются через вторые производные от потенциала

$$b_1 = \langle G_{ij}^{ZZ} q_i^x \rangle, \quad b_2 = \langle G_{ij}^{XZ} q_i^z \rangle,$$

$$b_1 + 2b_2 + b_4 = \langle G_{ij}^{XX} q_i^x \rangle. \quad (21)$$

Явные выражения для них имеют вид

$$\langle G_{ij}^{ZZ} q_i^x \rangle = \langle 24 \left\{ \left(\frac{7}{r_{ij}^6} - 2 \right) \frac{2}{r_{ij}^{10}} \left[(r_j \sqrt{1 - \eta_j^2} \sin \varphi - r_i \sqrt{1 - \eta_i^2})^2 + r_j^2 (1 - \eta_j^2) \cos^2 \varphi \right] - \frac{1}{r_{ij}^8} \left(\frac{2}{r_{ij}^6} - 1 \right) \right\} r_i \eta_i \rangle;$$

$$\langle G_{ij}^{XZ} q_i^z \rangle = \langle \frac{48}{r_{ij}^{10}} \left(\frac{7}{r_{ij}^6} - 2 \right) (r_j \eta_j + b_{ij} - r_i \eta_i) r_i \sqrt{1 - \eta_i^2} \times$$

$$\times (r_j \sqrt{1 - \eta_j^2} \sin \varphi - r_i \sqrt{1 - \eta_i^2}) \rangle;$$

$$\langle G_{ij}^{XX} q_i^x \rangle = \langle 24 \left[\frac{4}{r_{ij}^{10}} \left(\frac{7}{r_{ij}^6} - 2 \right) (r_j \eta_j + b_{ij} - r_i \eta_i)^2 - \frac{1}{r_{ij}^8} \left(\frac{2}{r_{ij}^6} - 1 \right) \right] r_i \eta_i \rangle. \quad (22)$$

Рассмотрим далее преобразование (3) к виду (14). Для тензоров второго ранга, входящих в (3), используем представление, аналогичное (7):

$$\langle G_{ij}^{\alpha\nu} q_i^\nu \rangle = d_1 \delta_{\alpha\nu} + d_2 n_i^\alpha n_i^\nu \quad (23)$$

Просуммируем (23) по 12-ти ближайшим к частице i

$$\sum_{j \neq i}^{12} \langle G_{ij}^{\alpha\nu} q_i^\nu \rangle = 12 d_1 \delta_{\alpha\nu} + \frac{12}{3} d_2 \delta_{\alpha\nu} = (12 d_1 + 4 d_2) \delta_{\alpha\nu}. \quad (24)$$

Тензор четвертого ранга в (3) представим следующим набором компонентов:

$$\langle G_{ij}^{\beta\gamma} q_i^\alpha q_i^\nu \rangle = \chi_1 \delta_{\alpha\nu} \delta_{\beta\gamma} + \chi_2 \delta_{\alpha\beta} \delta_{\nu\gamma} + \chi_3 \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\nu\beta} + \chi_5 \delta_{\alpha\beta} n_{ij}^\nu n_{ij}^\gamma +$$

$$+ \chi_6 \delta_{\alpha\gamma} n_{ij}^\nu n_{ij}^\beta + \chi_7 \delta_{\nu\beta} n_{ij}^\alpha n_{ij}^\gamma + \chi_8 \delta_{\nu\gamma} n_{ij}^\alpha n_{ij}^\beta + \chi_9 \delta_{\beta\gamma} n_{ij}^\alpha n_{ij}^\nu +$$

$$+ \chi_{10} n_{ij}^\alpha n_{ij}^\beta n_{ij}^\nu n_{ij}^\gamma. \quad (25)$$

При суммировании (25) по ближайшему окружению частицы j для последнего слагаемого используем представление

$$\sum_{j \neq i}^{12} n_{ij}^{\alpha} n_{ij}^{\beta} n_{ij}^{\nu} n_{ij}^{\gamma} = \frac{4}{5} (\delta_{\alpha\beta} \delta_{\nu\gamma} + \delta_{\alpha\nu} \delta_{\beta\gamma} + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\nu}). \quad (26)$$

Учитывая (26), получим

$$\sum_{j \neq i}^{12} \langle G_{ij}^{\beta\gamma} q_i^{\alpha} q_i^{\nu} \rangle = (12\chi_1 + 4\chi_4 + 4\chi_9 + \frac{4}{9}\chi_{10}) \delta_{\alpha\nu} \delta_{\beta\gamma} + (12\chi_2 + 4\chi_5 + 4\chi_8 + \frac{4}{5}\chi_{10}) \delta_{\alpha\beta} \delta_{\nu\gamma} + (12\chi_3 + 4\chi_6 + 4\chi_7 + \frac{4}{5}\chi_{10}) \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\nu\beta}. \quad (27)$$

Используя (24), (27) в (3) и сопоставляя с (14), находим:

$$\begin{aligned} \omega_1^2 &= \frac{1}{\sigma^2} (12\chi_2 + 4\chi_5 + 4\chi_8 + \frac{4}{5}\chi_{10}); \\ \omega_2^2 &= \frac{1}{\sigma^2} (12\chi_1 + 4\chi_4 + 4\chi_9 + \frac{4}{5}\chi_{10} + 12d_1 + 4d_2); \\ \omega_3^2 &= \frac{1}{\sigma^2} (12\chi_3 + 4\chi_6 + 4\chi_7 + \frac{4}{5}\chi_{10} + 24d_1 + 8d_2). \end{aligned} \quad (28)$$

В соответствии с (23) коэффициенты d_1 и d_2 выражаются через первые производные от потенциала:

$$d_1 = \langle G_{ij}^Z q_i^Z \rangle, \quad d_1 + d_2 = \langle G_{ij}^X q_i^X \rangle, \quad (29)$$

которые вычисляются по формулам:

$$\begin{aligned} \langle G_{ij}^Z q_i^Z \rangle &= \langle \frac{24}{r_{ij}^8} (\frac{2}{r_{ij}^6} - 1) \frac{r_i}{2} \sqrt{1 - \eta_i^2} (r_j \sqrt{1 - \eta_j^2} \sin \varphi_j - \\ &- r_i \sqrt{1 - \eta_i^2}) \rangle; \\ \langle G_{ij}^X q_i^X \rangle &= \langle \frac{24}{r_{ij}^8} (\frac{2}{r_{ij}^6} - 1) (r_j \eta_j + b_{ij} - r_i \eta_i) r_i \eta_i \rangle. \end{aligned} \quad (30)$$

Для коэффициентов χ из (25):

$$\begin{aligned} \chi_1 &= \langle G_{ij}^{ZZ} q_i^y q_i^y \rangle, \chi_2 = \chi_3 = \langle G_{ij}^{ZY} q_i^z q_i^y \rangle, \chi_1 + \chi_4 = \\ &= \langle G_{ij}^{ZZ} q_i^x q_i^x \rangle; \\ \chi_2 + \chi_5 &= \chi_3 + \chi_6 = \chi_3 + \chi_7 = \chi_2 + \chi_7 = \langle G_{ij}^{ZX} q_i^z q_i^x \rangle; \\ \chi_1 + \chi_9 &= \langle G_{ij}^{XX} q_i^z q_i^z \rangle, \chi_1 + 2\chi_2 + \chi_4 + 4\chi_5 + \chi_9 + \chi_{10} = \\ &= \langle G_{ij}^{XX} q_i^x q_i^x \rangle. \end{aligned} \quad (31)$$

Явные выражения для других средних:

$$\begin{aligned}
 \langle G_{ij}^{ZZ} q_i^y q_i^y \rangle &= \langle 12r_i^2(1 - \eta_i^2) \left\{ \frac{1}{r_{ij}^{10}} \left(\frac{7}{r_{ij}^6} - 2 \right) [(r_j \sqrt{1 - \eta_j^2} \sin \varphi - \right. \\
 &\quad \left. - r_i \sqrt{1 - \eta_i^2})^2 + 3r_j^2(1 - \eta_j^2) \cos^2 \varphi_j] - \frac{1}{r_{ij}^8} \left(\frac{2}{r_{ij}^6} - 1 \right) \right\} \rangle ; \\
 \langle G_{ij}^{ZY} q_i^z q_i^y \rangle &= \langle 12 \left(\frac{7}{r_{ij}^6} - 2 \right) \frac{r_i^2(1 - \eta_i^2)}{r_{ij}^{10}} [(r_j \sqrt{1 - \eta_j^2} \sin \varphi - \\
 &\quad - r_i \sqrt{1 - \eta_i^2})^2 - r_j^2(1 - \eta_j^2) \cos^2 \varphi_j] \rangle ; \\
 \langle G_{ij}^{ZZ} q_i^x q_i^x \rangle &= \langle 27 \left\{ \left(\frac{7}{r_{ij}^6} - 2 \right) \frac{2}{r_{ij}^{10}} [(r_j \sqrt{1 - \eta_j^2} \sin \varphi_j - \right. \\
 &\quad \left. - r_i \sqrt{1 - \eta_i^2})^2 + r_j^2(1 - \eta_j^2) \cos^2 \varphi_j] - \frac{1}{r_{ij}^8} \left(\frac{2}{r_{ij}^6} - 1 \right) \right\} r_i^2 \eta_i^2 \rangle ; \\
 \langle G_{ij}^{ZX} q_i^z q_i^x \rangle &= \langle \frac{48}{r_{ij}^{10}} \left(\frac{7}{r_{ij}^6} - 2 \right) (r_j \eta_j + b_{ij} - r_i \eta_i) r_i^2 \sqrt{1 - \eta_i^2} \eta_i \times \\
 &\quad \times (r_j \sqrt{1 - \eta_j^2} \sin \varphi_j - r_i \sqrt{1 - \eta_i^2}) \rangle ; \\
 \langle G_{ij}^{XX} q_i^z q_i^z \rangle &= \langle 12 \left[\frac{4}{r_{ij}^{10}} \left(\frac{7}{r_{ij}^6} - 2 \right) (r_j \eta_j + b_{ij} - r_i \eta_i)^2 - \right. \\
 &\quad \left. - \frac{1}{r_{ij}^8} \left(\frac{2}{r_{ij}^6} - 1 \right) \right] r_i^2 (1 - \eta_i^2) \rangle ; \\
 \langle G_{ij}^{XX} q_i^x q_i^x \rangle &= \langle 24 \left[\frac{4}{r_{ij}^{10}} \left(\frac{7}{r_{ij}^6} - 2 \right) (r_j \eta_j + b_{ij} - r_i \eta_i)^2 - \right. \\
 &\quad \left. - \frac{1}{r_{ij}^8} \left(\frac{2}{r_{ij}^6} - 1 \right) \right] r_i^2 \eta_i^2 \rangle . \tag{32}
 \end{aligned}$$

Коэффициент e_1 из (16) определяется соотношением

$$\begin{aligned}
 e_1 = \langle G_{ij}^{XX} q_i^x q_i^x \rangle &= \langle 24 \left[\frac{4}{r_{ij}^{10}} \left(\frac{7}{r_{ij}^6} - 2 \right) (r_j \eta_j + b_{ij} - r_i \eta_i)^2 - \right. \\
 &\quad \left. - \frac{1}{r_{ij}^8} \left(\frac{2}{r_{ij}^6} - 1 \right) \right] r_i \eta_i r_j \eta_j \rangle . \tag{33}
 \end{aligned}$$

Результаты вычисления на ЭВМ коэффициентов согласно (20), (22), (30), (32), (33), входящих в (18), (21), (28) – (31) при различных значениях температуры θ и объема v приведены в табл. 1.

Анализируя структуру системы уравнений (10), (11), заметим, что вклад второго приближения, обусловленный функциями f , пропорционален b_4/σ (из приведенной таблицы видно, что ведущим среди коэффициентов b является $b_4 \sim \langle G_{ij}^{xx} q_i^z \rangle$). В свою очередь функции f возбуждаются благодаря присутствию в (17) членов, содержащих β , и снова коэффициенты связи пропорциональны b_4/σ . Относительное влияние перекрестных эффектов должно сравниваться с влиянием самих функций β или f на свое изменение, т.е. в первом случае с ω^2 (см. (4)), а во втором – с $\omega_2^2 + \omega_3^2$. Поскольку последние ведут себя примерно одинаково и $\omega^2 \sim \langle G^{zz} \rangle$, параметр

Таблица 1

Зависимость средних значений производных потенциалов от температуры

	$\theta = 1$ $v = 0,98$	$\theta = 1$ $v = 0,92$	$\theta = 0,3$ $v = 0,92$	$\theta = 0,1$ $v = 0,92$
$\langle G_{ij}^{xx} \rangle$	117	152	116	105
$\langle G_{ij}^{zz} \rangle$	-2,4	-4,4	-3,1	-2,5
$\langle G_{ij}^{xx} q_i^x \rangle / \sigma$	35	42	23	13
$\langle G_{ij}^{zx} q_i^z \rangle / \sigma$	-5,2	-6,4	-2,2	-1,2
$\langle G_{ij}^{zz} q_i^x \rangle / \sigma$	-1,4	-1,9	-1,2	-0,7
$\langle G_{ij}^{xx} q_i^x \rangle / \sigma^2$	13	19	21	21
$\langle G_{ij}^{zz} q_i^z \rangle / \sigma^2$	-1,3	-1,9	-1,0	-0,9
$\langle G_{ij}^{xx} q_i^x q_i^x \rangle / \sigma^2$	46	59	40	40
$\langle G_{ij}^{zz} q_i^z q_i^z \rangle / \sigma^2$	37	49	38	35
$\langle G_{ij}^{zx} q_i^z q_i^x \rangle / \sigma^2$	-2,0	-2,0	-0,5	-0,2
$\langle G_{ij}^{zz} q_i^x q_i^x \rangle / \sigma^2$	-1,1	-1,9	-1,2	-0,9
$\langle G_{ij}^{zy} q_i^z q_i^y \rangle / \sigma^2$	0,29	0,27	0,04	0,01
$\langle G_{ij}^{zz} q_i^y q_i^y \rangle / \sigma^2$	0,71	-1,40	-0,97	-0,82
$\langle G_{ij}^{xx} q_i^x q_j^x \rangle / \sigma^2$	18	23	14	8
ω^2	450	570	440	400
ω_1^2	-0,22	0,22	0,82	0,48
ω_2^2	195	260	220	210
ω_3^2	83	125	150	156
$(\langle G_{ij}^{xx} q_i^x \rangle / \sigma \langle G_{ij}^{xx} \rangle)^2$	0,090	0,077	0,039	0,016

$$\lambda = \left(\frac{\langle G_{ij}^{xx} q_i^x \rangle}{\sigma \langle G_{ij}^{xx} \rangle} \right)^2$$

может рассматриваться как качественный критерий влияния второго приближения теории. Из таблицы следует, что при переходе от $\theta = 1$ и $\nu = 0,98$ к $\theta = 0,3$ и $\nu = 0,92$ значение этого критерия уменьшается более чем в два раза, и при дальнейшем понижении температуры эта тенденция сохраняется. Для гармонического взаимодействия $G_{ij}^{zz} = \text{const}$ и введенный параметр обращается в нуль. Таким образом, при переходе к состояниям кристалла, близким к гармоническим, влияние второго приближения или, что эквивалентно, вклад многочастичных корреляций и ангармоничности взаимодействия уменьшается. При описании динамического поведения кристалла вблизи линии плавления корреляции высших порядков играют существенную роль.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ротт Л.А. Статистическая теория молекулярных систем. — М.: Наука, 1979. — 280 с.
2. Вихренко В.С., Кулак М.И. Метод приведенных динамических функций в теории временных корреляционных функций. — ДАН БССР, 1980, т. 24, с. 129–132.
3. Кулак М.И., Вихренко В.С. Исследование временных корреляционных функций с помощью кинетического уравнения. — Весті АН БССР. Сер. фіз.-мат.наук, 1980, № 6, с. 90–94.
4. Кулак М.И., Вихренко В.С. Временные корреляционные функции импульсов частиц молекулярного кристалла. — Весті АН БССР. Сер. фіз.-мат.наук, 1982, № 5, с. 91–97.
5. Вихренко В.С., Кулак М.И. К исследованию динамического поведения системы многих частиц. — В кн.: Теоретическая и прикладная механика. Минск: Выш. шк., 1982, вып. 9, с.106–112.
6. Кулак М.И., Вихренко В.С., Ротт Л.А. Динамическое поведение примеси замещения в молекулярном кристалле. — В кн.: Теоретическая и прикладная механика. Минск: Выш. школа, 1983, вып. 10, с. 83–89.
7. Кулак М.И. Исследование динамических свойств молекулярных конденсированных систем на основе кинетических функций условных распределений. Дис. ... канд. физ.-мат. наук. — Минск, 1982. — 164 с.

УДК 621.01

В.К.АКУЛИЧ, канд.техн.наук,
Э.И.АСТАХОВ (БПИ)

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЗАКОНА ДВИЖЕНИЯ ВЕДУЩЕГО ЗВЕНА МЕХАНИЗМА ПРИВОДА С УЧЕТОМ МЕХАНИЧЕСКОЙ ХАРАКТЕРИСТИКИ ДВИГАТЕЛЯ

В работе [1] показана методика кинематического и силового анализа пространственного механизма при условии постоянства угловой скорости ведущего звена. Однако в реальных динамических условиях угловая скорость ведущего звена будет переменной. В данной работе показано определение действительной скорости ведущего звена пространственного механизма в приводе от электродвигателя с учетом трения в кинематических парах. Задача решается для холостого хода при отсутствии сил полезных сопротивлений.