$$\beta^{n+1} = 2\beta^{n} - \beta^{n-1} + \ddot{\beta}^{n} h_t^2 + \beta^{(IV)n} \frac{h_t^4}{12} . \qquad (25)$$

Сеточная функция $\beta^n \in \Omega_t = \{ t_n = h_t n,\ n = 0,1,\dots \}$ аппроксимирует функции $\beta_k^e$ и $\beta_k^d$. Производные $\ddot{\beta}^n$ и $\beta^{(IV)n}$ на n-м временном слое вычислялись по (14), (15).

В расчетах было принято максимальное значение z = 200, что с учетом симметрии гранецентрированной решетки соответствует системе, состоящей из 16756 частиц. При решении задачи методами молекулярной динамики с учетом такого количества частиц пришлось бы интегрировать систему порядка десяти тысяч уравнений, тогда как полное использование свойств симметрии позволило ограничиться интегрированием системы всего 907 уравнений. Для ее решения требуется 60 минут работы ЭВМ средней мощности (ЕС-1022). Полученные в результате решения корреляционные функции импульсов согласуются с данными, полученными методом молекулярной динамики [5].

## 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, № 2, с. 129—132. 3. Кулак М.И., Вихренко В.С. Исследование временных корреляционных функций с помощью кинетического уравнения. — Весці АН БССР. Сер. фіз.-мат. навук, 1980, № 6, с. 90—94. 4. Verlet J. Computer "Experiments" on Classical Fluids. — Phys. Rev., 1968, v. 159, No 1, p. 98—103. 5. Dikey J.M., Paskin A. Computer Simulation of the Lattice Dynamics of Solids. — Phys. Rev., 1969, v. 188, no. 3, p. 1407—1418.

*УДК 536.1*

**В.В. Белов**, канд.физ.-мат.наук
(БТИ)

# АСИМПТОТИЧЕСКИЙ МЕТОД ВЫЧИСЛЕНИЯ ПОТЕНЦИАЛОВ СРЕДНИХ СИЛ

Описание механических и тепловых свойств кристаллов можно осуществить как в рамках традиционной динамической теории [1], так и на основе интенсивно развиваемых в последнее время статистических теорий [2—6], характерной чертой которых является тот или иной способ обрыва цепочки уравнений для частичных функций распределения. Специфические особенности метода условных распределений [5] позволяют эффективно решать эту задачу на уровне интегральных членов, имеющих смысл потенциалов средних сил (ПСС), что приводит к достаточно полному учету межчастичных корреляций. Последнее составляет существенное отличие развитой в [6] теории от подходов [2—4]. В данной работе рассматривается способ решения нелинейного интегрального уравнения для упомянутых ПСС, основанный на асимптотическом разложении интегралов.

Интегральное уравнение имеет вид [6]:

$$\exp\left[-\beta\varphi_{i,j}(\bar{y})\right] = \int_v \exp\left\{-\beta\left[\Phi(|\bar{y}-\bar{x}-\bar{R}|) - \varphi_{j,i}(\bar{x})\right]\right\} F(\bar{x})\,dx, \quad (1)$$

где Φ — потенциал межчастичного взаимодействия; $\varphi$ — ПСС; v — объем молекулярной ячейки; $\beta = 1/kT$; k — постоянная Больцмана; T — абсолютная температура; R — радиус-вектор, соединяющий соседние узлы в решетке:

$$F(\bar{x}) = \exp\left[-\beta\varphi_j(\bar{x})\right] / \int_v \exp\left[-\beta\varphi_j(\bar{x})\right] dx - \quad (2)$$

унарная функция распределения частицы в ячейке v, $\varphi_j = \sum_{l \neq j} \varphi_{j,l}$. Как известно, в равновесном кристалле отклонения частиц от равновесных положений — узлов решетки — малы по сравнению с расстояниями между узлами. Следовательно, унарная функция должна иметь острый пик в области узла, а так как правая часть (1) как раз содержит множителем унарную функцию, основной вклад в интеграл даст область вблизи узла. Это обстоятельство и позволяет получить для правой части (1) асимптотическое разложение при помощи метода Лапласа для кратных интегралов [7].

Итак, необходимо вычислить интеграл типа

$$J(\bar{y}, \lambda) = \int_v f(\bar{y}, \bar{x}) \exp\left[\lambda S(\bar{x})\right] dx, \quad (3)$$

когда λ — большое положительное число, функция $S(\bar{x})$ имеет максимум в нуле, т.е.

$$\nabla S(0) = 0, \quad \nabla\nabla S(0) < 0, \quad (4)$$

а функция $f(\bar{y}, \bar{x})$ непрерывна в рассматриваемой области v по обоим аргументам. При этих условиях для интеграла (3) справедливо асимптотическое разложение

$$J(\bar{y}, \lambda) \sim \lambda^{-3/2} \exp\left[\lambda S(0)\right] \sum_{n=0}^{\infty} a_n \lambda^{-n}. \quad (5)$$

Для нахождения коэффициентов этого разложения положим

$$A = -\nabla\nabla S(0), \quad S(\bar{x}, 0) = S(\bar{x}) - S(0) + \frac{1}{2}\bar{x}\cdot A\cdot\bar{x};$$
$$H(\bar{y}, \bar{x}) = f(\bar{y}, \bar{x}) \exp\left[\lambda S(\bar{x}, 0)\right]. \quad (6)$$

Тогда равенство (3) примет вид

$$J(\bar{y}, \lambda) \exp\left[-\lambda S(0)\right] = \int_v H(\bar{y}, \bar{x}) \exp\left[-\frac{\lambda}{2}\bar{x}\cdot A\cdot\bar{x}\right] dx. \quad (7)$$

Продолжим $f(\bar{y}, \bar{x})$ на все пространство $R^3$, положив $f(\bar{y}, \bar{x}) = 0$, когда $\bar{x} \notin v$, в результате чего

$$J(\bar{y}, \lambda) \exp\left[-\lambda S(0)\right] = \int_{R^3} H(\bar{y}, \bar{x}) \exp\left[-\frac{\lambda}{2}\bar{x}\cdot A\cdot\bar{x}\right] dx. \quad (8)$$



8 Зак. 5198

Совершим далее над функцией H преобразование Фурье

$$G(\bar{y}, \bar{\xi}) = \int_{R^3} H(\bar{y}, \bar{x}) \exp[i\, \bar{x}\cdot\bar{\xi}]\, dx. \tag{9}$$

Умножим обе части последнего равенства на одну и ту же величину и проинтегрируем. Будем иметь

$$\int_{R^3_\xi} G(\bar{y}, \bar{\xi}) \exp\left[-\frac{\gamma}{2}\, \bar{\xi}\cdot B\cdot\bar{\xi}\right] d\xi = \int_{R^3} dx\, H(\bar{y}, \bar{x}) \int_{R^3_\xi} \exp[i\bar{x}\cdot\bar{\xi} -$$

$$-\frac{\gamma}{2}\, \bar{\xi}\cdot B\cdot\bar{\xi}]\, d\xi. \tag{10}$$

Рассмотрим теперь внутренний интеграл в правой части (10) отдельно. Будем считать матрицу B симметричной, причем $\bar{\xi}\cdot B\cdot\bar{\xi} \geqslant 0$, что необходимо для абсолютной сходимости рассматриваемого интеграла. Тогда существует такое ортогональное преобразование U [8]

$$\bar{\xi} = U\cdot\bar{\eta};\quad \tilde{U}\cdot U = E;\quad \det U = 1, \tag{11}$$

которое приводит матрицу B к диагональному виду

$$\tilde{U}\cdot B\cdot U = D = \mathrm{diag}\,(b_1, b_2, b_3). \tag{12}$$

При этом

$$d\,\xi = \frac{\partial(\xi_1, \xi_2, \xi_3)}{\partial(\eta_1, \eta_2, \eta_3)}\, d\eta = \det U\, d\eta = d\eta. \tag{13}$$

Учитывая (11) – (13), запишем последовательно

$$\int_{R^3_\xi} d\xi \exp\left[i\bar{x}\cdot\bar{\xi} - \frac{\gamma}{2}\, \bar{\xi}\cdot B\cdot\bar{\xi}\right] = \int_{R^3_\eta} d\eta \exp\left[i\bar{x}\cdot U\cdot\bar{\eta} - \frac{\gamma}{2}\, \bar{\eta}\cdot\tilde{U}\cdot B\cdot U\cdot\bar{\eta}\right] =$$

$$= \int_{R^3_\eta} d\eta \exp\left[i\bar{z}\cdot\bar{\eta} - \frac{\gamma}{2}\, \bar{\eta}\cdot D\cdot\bar{\eta}\right] = \int_{R^3_\eta} d\eta \exp\left[\sum_{n=1}^{3} \left(iz_n\eta_n - \frac{\gamma}{2}\, b_n\eta_n^2\right)\right] =$$

$$= \prod_{n=1}^{3} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta_n \exp\left[i z_n \eta_n - \frac{\gamma}{2}\, b_n \eta_n^2\right]. \tag{14}$$

Здесь

$$\bar{z} = \tilde{U}\cdot\bar{x} = \bar{x}\cdot U. \tag{15}$$

Замена переменной $\eta_n = \mu_n + iz_n/\gamma b_n$ ликвидирует линейный по $\eta$ член в показателе экспоненты, так что

$$\prod_{n=1}^{3}\int_{-\infty}^{\infty} d\eta_n \exp\left[iz_n\eta_n - \frac{\gamma}{2} b_n \eta_n^2\right] = \prod_{n=1}^{3} \exp[-z_n^2/2\gamma b_n]\times$$

$$\times\int_{-\infty}^{\infty} d\mu_n \exp\left[-\frac{\gamma}{2} b_n \mu_n^2\right] = (2\pi/\gamma)^{3/2} \prod_{n=1}^{3} \exp[-z_n^2/2\gamma b_n]/\sqrt{b_n} =$$

$$= (2\pi/\gamma)^{3/2} \exp\left[-(z_1^2/b_1 + z_2^2/b_2 + z_3^2/b_3)/2\gamma\right]/\sqrt{b_1b_2b_3}\,. \tag{16}$$

Далее

$$b_1b_2b_3 = \det D = \det(\widetilde{U}\cdot B\cdot U) = \det B;\ \frac{z_1^2}{b_1} + \frac{z_2^2}{b_2} + \frac{z_3^2}{b_3} =$$

$$= \bar{z}\cdot D^{-1}\cdot\bar{z}, \tag{17}$$

$$D^{-1} = (\widetilde{U}\cdot B\cdot U)^{-1} = U^{-1}\cdot B^{-1}\cdot(\widetilde{U})^{-1} \tag{18}$$

в силу (11). С учетом (15), (18) и (11) второе из равенств (17) можно переписать так:

$$\bar{z}\cdot D^{-1}\cdot\vec{z} = \bar{x}\cdot U\cdot\widetilde{U}\cdot B^{-1}\cdot U\cdot\widetilde{U}\cdot\bar{x} = \bar{x}\cdot B^{-1}\cdot\bar{x}\,. \tag{19}$$

Имея в виду (8), (17) и (19), запишем преобразование Фурье экспоненты от квадратичной формы (14) в следующем виде:

$$\int_{R^3_\xi} d\xi \exp\left[i\bar{x}\cdot\bar{\xi} - \frac{\gamma}{2}\,\bar{\xi}\cdot B\cdot\bar{\xi}\right] = \frac{(2\pi/\gamma)^{3/2}}{\sqrt{\det B}} \exp\left[-\frac{1}{2\gamma}\,\bar{x}\cdot B^{-1}\cdot\bar{x}\right]. \tag{20}$$

Последнее равенство можно использовать для вычисления (10) и (8), если положить $\gamma = \lambda^{-1}$, $B = A^{-1}$. Подставив (20) в (10), получим

$$\int_{R^3} dx\, H(\bar{y},\bar{x}) \exp\left[-\frac{\lambda}{2}\,\bar{x}\cdot A\cdot\bar{x}\right] =$$

$$= \frac{(2\pi\lambda)^{-3/2}}{\sqrt{\det A}} \int_{R^3_\xi} d\xi\, G(\bar{y},\bar{\xi}) \exp\left[-\frac{1}{2\lambda}\,\bar{\xi}\cdot A^{-1}\cdot\bar{\xi}\right]. \tag{21}$$

Экспоненту из правой части последнего выражения можно разложить в ряд Тейлора, который будет быстро сходиться, поскольку показатель экспоненты мал. Проинтегрировав этот ряд почленно, получим

$$\int_{R^3} dx\, H(\bar{y},\bar{x}) \exp\left[-\frac{\lambda}{2}\,\bar{x}\cdot A\cdot\bar{x}\right] =$$



9 Зак. 5198

$$= \frac{(2\pi\lambda)^{-3/2}}{\sqrt{\det A}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!\,(2\lambda)^n} \int_{R^3} d\xi\, G(\bar{y},\bar{\xi})\ (\bar{\xi}\cdot A^{-1}\cdot\bar{\xi})^n. \tag{22}$$

Введя оператор

$$L = A^{-1} \cdot\cdot \nabla\nabla = B\cdot\cdot\nabla\nabla\ , \tag{23}$$

можно записать выражение для произвольного члена ряда (22) :

$$\int_{R^3_\xi} d\xi\, G(\bar{y},\bar{\xi})\,(\bar{\xi}\cdot A^{-1}\cdot\bar{\xi})^n = (-1)^n\ (2\pi)^3 L^n H(\bar{y},\bar{x})\Big|_{\bar{x}=0}. \tag{24}$$

Таким образом,

$$J(\bar{y},\lambda) = \frac{(2\pi/\lambda)^{3/2}}{\sqrt{\det A}} \exp[\lambda S(0)] \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!\,(2\lambda)^n} L^n H(\bar{y},\bar{x})\Big|_{\bar{x}=0} \tag{25}$$

При получении этого разложения никаких ограничений на матрицу A не налагалось, кроме тех, что она должна быть неособенной, а ее собственные значения – положительными, так что (25) применимо для описания кристаллов с любой симметрией решетки.

Вычислим коэффициенты разложения (25) в общем случае. При этом числитель и знаменатель (1) (см. (2)) будем разлагать отдельно.

Рассмотрим сначала числитель уравнения (1) :

$$J_1(\bar{y}) = \int_V \exp\left\{-\beta\,[\Phi(|\bar{y}-\bar{x}-\bar{R}|) + \varphi_j(\bar{x}) - \varphi_{j,i}(\bar{x})]\right\} dx. \tag{26}$$

В данном случае

$$f(\bar{y},\bar{x}) = \exp\left\{-\beta\,[\Phi(|\bar{y}-\bar{x}-\bar{R}|) - \varphi_{j,i}(\bar{x})]\right\}\ ;\quad S(\bar{x}) = -\beta\varphi_j(\bar{x}), \tag{27}$$

причем $\nabla\varphi_j(0) = 0$, так как это есть полная средняя сила, действующая на частицу в положении равновесия, и, согласно (6), $A = \beta\nabla\nabla\varphi_j(0) > 0$ по соображениям о поведении унарной функции. Выделенный параметр $\lambda$, по обратным степеням которого ведется разложение, здесь отсутствует, но, как видно из (23), разложение (25) содержит обратные степени матрицы A, собственные значения которой должны быть велики по тем же соображениям, так что, получив формально разложение (25), можно положить $\lambda = 1$.

Ограничимся здесь первыми двумя членами разложения (25), т.е.

$$J_1(y) = \frac{(2\pi)^{3/2}}{\sqrt{\det A}} \exp[-\beta\varphi_j(0)]\left\{H(\bar{y},0) + \frac{1}{2} LH(\bar{y},\bar{x})\Big|_{\bar{x}=0}\right\}. \tag{28}$$

Используя (6) и (27), первое слагаемое в фигурных скобках можно записать так:

$$H(\bar{y},0) = \exp\left\{-\beta\,[\Phi\,(|\bar{y}-\bar{R}|) - \varphi_{j,i}(0)]\right\}. \tag{29}$$

Теперь найдем явное выражение для второго слагаемого, приняв во внимание, что оператор L действует на переменные $\bar{x}$ :

$$LH(\bar{y},\bar{x}) = B\cdot\cdot\Big\{-\beta\,[\Phi''(|\bar{y}-\bar{x}-\bar{R}|) - \frac{\Phi'(|\bar{y}-\bar{x}-\bar{R}|)}{|\bar{y}-\bar{x}-\bar{R}|}\times$$

$$\times\frac{(\bar{y}-\bar{x}-\bar{R})\,(\bar{y}-\bar{x}-\bar{R})}{|\bar{y}-\bar{x}-\bar{R}|^2} - \nabla\nabla\varphi_{j,i}(x) + \frac{\Phi'(|\bar{y}-\bar{x}-\bar{R}|)}{|\bar{y}-\bar{x}-\bar{R}|}\,E] + \nabla\nabla S(\bar{x},0) +$$

$$+[\beta\,(\Phi'(|\bar{y}-\bar{x}-\bar{R}|)\,\frac{\bar{y}-\bar{x}-\bar{R}}{|\bar{y}-\bar{x}-\bar{R}|} + \nabla\varphi_{j,i}(\bar{x})\,) + \nabla S(\bar{x},0)\,]\,[\nabla S(\bar{x},0) +$$

$$+\beta\,(\Phi'(|\bar{y}-\bar{x}-\bar{R}|)\,\frac{\bar{y}-\bar{x}-\bar{R}}{|\bar{y}-\bar{x}-\bar{R}|} + \nabla\,\varphi_{j,i}(\bar{x}))\,]\Big\}\;H(y,\bar{x})\;, \tag{30}$$

причем

$$\nabla S(\bar{x},0) = \nabla S(\bar{x}) + A\cdot\bar{x};\nabla\nabla S(\bar{x},0) = \nabla\nabla S(\bar{x}) + A. \tag{31}$$

Поэтому

$$S(\bar{x},0)\Big|_{\bar{x}=0} = 0\;;\;\nabla S(\bar{x},0)\Big|_{\bar{x}=0} = 0;\;\nabla\nabla S(\bar{x},0)\Big|_{\bar{x}=0} = 0. \tag{32}$$

Таким образом,

$$J_1(\bar{y}) = \frac{(2\pi)^{3/2}}{\sqrt{\det A}}\;\exp\left\{-\beta\,[\Phi\,(|\bar{y}-\bar{R}|) + \varphi_j(0) - \varphi_{j,i}(0)\,]\right\}\Big\{1-$$

$$-\frac{\beta}{2}\,[\;\frac{(\bar{y}-\bar{R})\cdot B\cdot(\bar{y}-\bar{R})}{|\bar{y}-\bar{R}^{\,2}|}\;(\Phi''(|\bar{y}-\bar{R}|) - \frac{\Phi'(|\bar{y}-\bar{R}|)}{|\bar{y}-\bar{R}|}\,) +$$

$$+\frac{\Phi'(|\bar{y}-\bar{R}|)}{|\bar{y}-\bar{R}|}\;SpB - \beta\,(\Phi'(|\bar{y}-\bar{R}|)\;\frac{\bar{y}-\bar{R}}{|\bar{y}-\bar{R}|} + \nabla\varphi_{j,i}(0))\cdot B\times$$

$$\times(\Phi'(|\bar{y}-\bar{R}|)\;\frac{\bar{y}-\bar{R}}{|\bar{y}-\bar{R}|} + \nabla\varphi_{j,i}(0)\,) - B\cdot\cdot\nabla\nabla\varphi_{j,i}(0)\,]\Big\}. \tag{34}$$

При вычислении знаменателя

$$J_2 = \int_V \exp\,[-\beta\varphi_j\;(\bar{x})\,]\,dx = \exp\,[-\beta\,\varphi_j(0)\,]\,\int_V \exp\,[S(\bar{x},0) -$$

$$-\frac{1}{2}\,\bar{x}\cdot A\cdot\bar{x}\;]\;dx \tag{35}$$

нужно ограничиться только главным членом разложения, потому что в данном случае $f = 1, H(\bar{x}) = \exp\,[S(\bar{x},0)\,]$ и

$$LH(\bar{x})\Big|_{\bar{x}=0} = B\,..\Big\{\nabla\nabla S(\bar{x},0) + \nabla S(\bar{x},0)\nabla S(\bar{x},0)\Big\}\;H(\bar{x})\Big|_{\bar{x}=0} = 0,$$

так что второй член разложения будет уже порядка $B^2$, или $A^{-2}$. Для (35) поэтому будем иметь



$9^*$

$$J_2 = \frac{(2\pi)^{3/2}}{\sqrt{\det A}} \exp\left[-\beta\varphi_j(0)\right]. \tag{36}$$

Подставив (34) и (36) в (1), получим

$$\varphi_{i,j}(\bar y) = \Phi(|\bar y - \bar R|) - \varphi_{j,i}(0) - \frac{1}{\beta}\ln\Big\{1 -$$

$$-\frac{\beta}{2}\Big[\frac{\Phi'(|\bar y - \bar R|)}{|\bar y - \bar R|}\,\mathrm{Sp}B - B\cdot\cdot\ \nabla\nabla\varphi_{j,i}(0) +$$

$$+\frac{(\bar y - \bar R)\cdot B\cdot(\bar y - \bar R)}{|\bar y - \bar R|^2}\left(\Phi''(|\bar y - \bar R|) - \frac{\Phi'(|\bar y - \bar R|)}{|\bar y - \bar R|}\right) - \tag{37}$$

$$-\beta\left(\Phi''(|\bar y - \bar R|)\frac{\bar y - \bar R}{|\bar y - \bar R|} + \nabla\varphi_{j,i}(0)\cdot\right)\cdot B\cdot\left(\Phi'(|\bar y - \bar R|)\frac{\bar y - \bar R}{|\bar y - \bar R|} +\right.$$

$$\left. + \nabla\varphi_{j,i}(0)\Big]\Big\}\right. .$$

Для кристаллов благородных газов, имеющих высокосимметричную гранецентрированную кубическую решетку [9], матрица A должна быть изотропной [10], т.е. $A = \beta\sigma E$, откуда $\beta\sigma = \frac{\beta}{3}\ \Delta\varphi_j(0)$ и $\det A = (\beta\sigma)^3$. В этом случае уравнение (37) приобретает вид

$$\varphi(\bar y) = \Phi(|\bar y - \bar R|) - \varphi(0) - \frac{1}{\beta}\ln\Big\{1 - \frac{1}{2\sigma}\Big[\Phi''(|\bar y - \bar R|) + \tag{38}$$

$$+\frac{2\Phi'(|\bar y - \bar R|)}{|\bar y - \bar R|} - \Delta\varphi(0) - \beta\left(\Phi'(|\bar y - \bar R|)\frac{\bar y - \bar R}{|\bar y - \bar R|} - \nabla\varphi(0)\right)^2\Big]\Big\}.$$

Взяв первую и вторую производные в нуле от обеих частей последнего равенства, получим следующую систему алгебраических уравнений:

$$g = \frac{2\beta\Phi''g - \Phi_3}{\beta(2\sigma - \Phi_2 + \beta g^2 - \Delta\varphi)}\ ;\quad \Delta\varphi \doteq \Phi_2 + \beta g^2 + g\,\frac{\Phi_4 - 2\beta(P + \Phi_3 g)}{2\beta\Phi''g - \Phi_3}, \tag{39}$$

где обозначено:

$$\nabla\varphi(0) = a\,\bar R/R;\ g = \Phi' + a\ ;\ \Phi_2 = \Phi'' + 2\Phi'/R;$$

$$\Phi_3 = \Phi^{(3)} + 2(\Phi'' - \Phi'/R)/R;$$

$$\Phi_4 = \Phi^{(4)} + 4\Phi^{(3)}/R;\ P = (\Phi'')^2 + 2(\Phi'/R)^2.$$

К уравнениям (39) нужно присоединить еще соотношение, связывающее $\sigma$ и $\Delta\varphi$:

$$\sigma = \frac{1}{3}\Delta\varphi_j = \frac{z}{3}\Delta\varphi, \tag{40}$$

если ограничиться учетом только z ближайших соседей.

Таким образом, нелинейное интегральное уравнение (1) сведено к системе алгебраических уравнений (39), решать которые значительно легче, чем уравнение интегральное.

Решив систему (39), (40), найдем статическую часть энергии решетки $\varphi_j = z\varphi$, где $\varphi$ определяется равенством (38) при $\bar{y} = 0$, после чего можно рассчитать все термодинамические характеристики кристалла.

## Литература

1. Борн М., Хуан Кунь. Динамическая теория кристаллических решеток/Пер. с англ. , под ред. И.М. Лифшица. — М.: Изд-во иностр. лит., 1958. — 488 с. 2. Базаров И.П. Статистическая теория кристаллического состояния. — М.: МГУ, 1971. — 118 с. 3. Ольховский И. И. О стационарных функциях распределения вандер-ваальсовского кристалла.—ДАН СССР,1973,т.208,№4,с.808—810.4.3убов В.И. Вопросы статистической теории кристалла. — М.: УДН, 1975. —114 с. 6. Брук-Левинсон Э.Т. Межчастичные корреляции в кристалле. — ДАН БССР, 1977, т. 21, № 6, с. 511—514. 5. Ротт Л.А. Статистическая теория молекулярных систем. — М.: Наука, 1979. — 280 с. 7. Федорюк М.В. Метод перевала. —М.: Наука, 1977. — 368 с. 8. Беллман Р. Введение в теорию матриц. — М.: Наука, 1969. 9. Лейбфрид Г. Микроскопическая теория механических и тепловых свойств кристаллов. — М. — Л.: Физматгиз, 1963. — 312 с. 10. Лохин В.В., Седов Л.И. Нелинейные тензорные функции от нескольких тензорных аргументов. — ПММ, 1963, т. 27, вып. 3, с. 393—418.

*УДК 621.928.6*

**Н.И. Горбач,** канд.техн.наук
(БПИ)

# ИССЛЕДОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ ЧАСТИЦ ПРИ ПНЕВМАТИЧЕСКОЙ СЕПАРАЦИИ СЫПУЧИХ МАТЕРИАЛОВ

Рассматривается движение частиц при пневматической сепарации песчано-гравийной смеси в свободной воздушной струе. Теоретические исследования движения частиц без учета расширения струи приведены в работе [1]. В действительности при выходе воздуха из патрубка ширина струи увеличивается, что приводит к падению скорости на ее оси и по сечению (рис. 1).

Закономерности истечения и аэродинамика свободных воздушных струй достаточно хорошо исследованы и описаны в специальной литературе [2,3]. Характерной особенностью свободной струи является то, что осевая скорость воздуха в пределах длины начального участка остается постоянной, хотя скорость воздуха по сечению изменяется. При этом для каждого сечения соответствует своя эпюра скоростей. Аналитических зависимостей, описывающих закономерности изменения скорости как по длине потока, так и в поперечном сечении, в литературе не имеется. Такие зависимости получены толь-