

І. Р. ЮХНОВСЬКИЙ, В. О. КОЛОМІЄЦЬ,
І. М. ІДЗИК

ОПИС ОКОЛУ КРИТИЧНОЇ ТОЧКИ РІДИНА — ГАЗ
РЕАЛЬНИХ ПРОСТИХ СИСТЕМ ЗА МЕТОДОМ
КОЛЕКТИВНИХ ЗМІННИХ. І. СИСТЕМА
ВІДЛІКУ ТА ОБЛАСТЬ $T > T_c$

Метод колективних змінних з виділеною системою відліку застосовується до опису околу критичної точки простих реальних речовин типу інертних газів. Запропоновано спосіб виділення з повного ефективного попарного потенціалу міжчастинкової взаємодії потенціалу взаємодії в системі відліку та «далекодіючого» притягання, що приводить до фазового переходу рідина — газ. Наведено результати числових розрахунків для аргону.

Функціональне представлення для великої статистичної суми в методі колективних змінних з виділеною системою відліку. У працях [1—3] нами розглянуто основні питання застосування методу колективних змінних з виділеною системою відліку до опису критичної точки рідина — газ у класичній однорідній системі попарно взаємодіючих частинок. Суть запропонованого підходу було проілюстровано на прикладі, коли в ролі системи відліку використовується система твердих сфер. У цьому випадку термодинамічні та структурні властивості системи відліку відомі, що дозволяє знайти явні вирази для коефіцієнтних функцій, за допомогою яких будуються вихідний вираз для конфігураційного інтеграла. У результаті конфігураційний інтеграл приводиться до вигляду функціоналу, означеного на деякій блочній ґратці.

Наведемо основні моменти запропонованого підходу. Класичну однорідну систему N частинок, що знаходяться в об'ємі V , будемо описувати за допомогою ефективного попарного потенціалу $U(r)$. У потенціалі $U(r)$ виділимо короткодіючу складову $\varphi(r)$, що визначає в основному взаємне розташування частинок при малих відстанях між ними і враховується в системі відліку, та далекодіючу, яка характеризує притягання і приводить до фазового переходу:

$$U(r) = \varphi(r) + \Phi(r). \quad (1)$$

У випадку твердих сфер

$$\varphi(r) = \begin{cases} \infty, & r \leq \sigma, \\ 0, & r > \sigma, \end{cases} \quad (2)$$

де σ — діаметр сфери.

Вважаємо, що потенціал $\Phi(r)$ має фур'є-образ

$$\tilde{\Phi}(k) = \int \Phi(r) e^{ikr} dr, \quad (3)$$

мінімум якого знаходиться в точці $k = 0$: $\min \tilde{\Phi}(k) = \tilde{\Phi}(0) < 0$. Введемо точкову густину числа частинок

$$\hat{n}(r) = \sum_{i=1}^N \delta(r - r_i),$$

а також колективні змінні ρ_k за допомогою співвідношення

$$\hat{\rho}_k = \int J(\rho, r) \rho_k d\rho_k,$$

де

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_k &= \int \hat{n}(r) e^{-ikr} dr = \hat{\rho}_k^c - i\hat{\rho}_k^s; \\ d\rho_k &= d\rho_k^c d\rho_k^s; \quad \rho_k = \rho_k^c - i\rho_k^s; \end{aligned}$$

© І. Р. Юхновський, В. О. Коломієць, І. М. Ідзик, 1993

$\mathbf{r}_i, i = 1, 2, \dots, N$, — координати частинок; $J(\rho, \mathbf{r})$ — оператор переходу від декартових змінних до колективних.

Компоненти вектора k приймають значення

$$k_i = \frac{2\pi}{V^{1/3}} n_i, \quad n_i = 0, 1, \dots, \infty.$$

Використаємо для опису системи формалізм великого канонічного ансамблю, вихідною функцією в якому є велика статистична сума

$$\Xi = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} Q_n.$$

Тут Q_n — конфігураційний інтеграл для системи n частинок.

Активність зобразимо у вигляді добутку $z = z_{RS} \tilde{z} = \lambda e^{\beta(\mu_{RS} + \mu)}$, де z_{RS}, μ_{RS} — активність і хімічний потенціал системи відліку.

Враховуючи зроблені відносно потенціалу міжчастинкової взаємодії припущення, маємо

$$\Xi = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z_{RS}^n}{n!} \int \exp \left\{ -\beta \sum_{i < j} \varphi(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) + V \bar{N} \beta \hat{\rho}_0 \left(\tilde{\mu} + \frac{1}{2} \tilde{\Phi}(0) \right) \right\} \times \\ \times \exp \left\{ -\frac{\beta}{2} \frac{N}{V} \sum_{\mathbf{k}} \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) \hat{\rho}_{\mathbf{k}} \hat{\rho}_{-\mathbf{k}} \right\} (d\mathbf{r})^N.$$

В останньому виразі перейдемо до колективних змінних $\rho_{\mathbf{k}}$:

$$\Xi = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z_{RS}^n}{n!} \int \exp \left\{ -\beta \sum_{i < j} \varphi(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) + V \bar{N} \beta \rho_0 \left(\tilde{\mu} + \frac{1}{2} \tilde{\Phi}(0) \right) \right\} \times \\ \times \exp \left\{ -\frac{\beta}{2} \frac{N}{V} \sum_{\mathbf{k}} \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \right\} J(\rho) (d\mathbf{r})^N (d\rho)^N.$$

Використаємо для оператора переходу до колективних змінних наступне представлення:

$$J(\rho) = \prod_{\mathbf{k}} \delta(\rho_{\mathbf{k}} - \hat{\rho}_{\mathbf{k}}) \equiv \delta(\rho_0 - V \bar{N}) \prod_{\mathbf{k} \neq 0} \delta(\rho_{\mathbf{k}}^c - \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^c) \delta(\rho_{\mathbf{k}}^s - \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^s) = \\ = \int \exp \{ i 2\pi \omega_0 (\rho_0 - V \bar{N}) \} d\omega_0 \prod_{\mathbf{k} \neq 0} \int \exp \{ 2\pi i [\omega_{\mathbf{k}}^c (\rho_{\mathbf{k}}^c - \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^c) + \\ + \omega_{\mathbf{k}}^s (\rho_{\mathbf{k}}^s - \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^s)] \} d\omega_{\mathbf{k}}^c d\omega_{\mathbf{k}}^s. \quad (4)$$

Виконавши інтегрування за декартовими координатами частинок, для великої статистичної суми одержуємо вираз [3]

$$\Xi = \Xi_{RS} \int \exp \left\{ \mu V \bar{N} \rho_0 - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \alpha(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - i 2\pi V \bar{N} \omega_0 + i 2\pi \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} \right\} \times \\ \times \exp \left\{ -\frac{(2\pi)^2}{2} \sum_{\mathbf{k}} \mathfrak{M}_2(\mathbf{k}) \omega_{\mathbf{k}} \omega_{-\mathbf{k}} + \frac{i(2\pi)^3}{3! V \bar{N}} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3} \mathfrak{M}_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) \delta(\mathbf{k}_1 + \right. \\ \left. + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3) \omega_{\mathbf{k}_1} \omega_{\mathbf{k}_2} \omega_{\mathbf{k}_3} + \frac{(2\pi)^4}{4! V \bar{N}} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4} \mathfrak{M}_4(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4) \delta(\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4) \times \right. \\ \left. \times \omega_{\mathbf{k}_1} \omega_{\mathbf{k}_2} \omega_{\mathbf{k}_3} \omega_{\mathbf{k}_4} \right\} (d\rho)^N (d\omega)^N, \quad (5)$$

де $\mu = \beta \left(\tilde{\mu} + \frac{1}{2} \tilde{\Phi}(0) \right)$; $\alpha(\mathbf{k}) = \frac{N}{V} \beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k})$; Ξ_{RS} — статистична сума системи відліку; $\mathfrak{M}_n(k_1, \dots, k_n)$ — кумулянти системи відліку.

У даній статті обмежимося розглядом моделі “ ω^4, ρ^4 ”, зберігаючи в експоненті підінтегральної функції лише доданки до 4-го порядку за ω і ρ включно.

Величини $\mathfrak{M}_n(k_1, \dots, k_n)$ є складними функціями хвильових векторів k_1, \dots, k_n і виражаються через кореляційні функції системи відліку [4].

Наприклад,

$$\mathfrak{M}_2(k) = \frac{1}{1 - \rho C_k}, \quad (6)$$

де C_k — фур'є-образ прямої кореляційної функції системи відліку.

Старші кумулянти $\mathfrak{M}_3(k_1, k_2, k_3)$, $\mathfrak{M}_4(k_1, \dots, k_4)$ виражаються відповідно через вищі кореляційні функції, які можуть бути знайдені, наприклад, з використанням ланцюжка рівнянь Боголюбова. У праці [5] одержано вирази для кумулянтів \mathfrak{M}_3 та \mathfrak{M}_4 у випадку редукованої залежності від хвильових векторів:

$$\begin{aligned} \mathfrak{M}_3(0, k, -k) &= \\ &= \mathfrak{M}_2(0) \left[\mathfrak{M}_2(k) + \eta \frac{\partial \mathfrak{M}_2(k)}{\partial \eta} \right], \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \mathfrak{M}_4(0, 0, k, -k) &= \\ &= \mathfrak{M}_2(0) \left[\mathfrak{M}_2(k) \mathfrak{M}_2(0) + \right. \\ &+ 3\eta \mathfrak{M}_2(0) \frac{\partial \mathfrak{M}_2(k)}{\partial \eta} + \eta \mathfrak{M}_2(k) \frac{\partial \mathfrak{M}_2(0)}{\partial \eta} + \\ &+ \eta^2 \frac{\partial \mathfrak{M}_2(0)}{\partial \eta} \frac{\partial \mathfrak{M}_2(k)}{\partial \eta} + \\ &\left. + \eta^2 \mathfrak{M}_2(0) \frac{\partial^2 \mathfrak{M}_2(k)}{\partial \eta^2} \right], \end{aligned} \quad (8)$$

де $\eta = \frac{\pi}{6} \frac{N}{V} \sigma^3$ — приведена густина.

Очевидно, що ключовим моментом є розрахунок прямої кореляційної функції системи відліку $C(r)$. Ця проблема суттєво спрощується, коли система відліку є системою твердих сфер, для якої $C(r)$ відоме [6].

Таким чином може бути одержана вихідна форма для функціоналу статистичної суми.

Для конкретно вибраної вихідної системи частинок, яка може бути описана за допомогою попарного потенціалу, система твердих сфер може бути введена, наприклад, за методом Баркера — Хендерсона [7] чи Вікса — Чандлера — Андерсена [8]. Далекодіюча складова $\Phi(r)$ повного потенціалу в (1) при цьому виражається однозначно. У загальному випадку її фур'є-образ $\tilde{\Phi}(k)$ буде від'ємним біля початку координат і в деякому інтервалі $0 \leq |k| \leq B \sim \pi/\sigma$ і затухає при збільшенні $|k|$, осцилюючи з періодом, близьким до $2B$.

Така форма залежності $\tilde{\Phi}(k)$ дозволяє зробити певне спрощення у вихідному виразі (4) для конфігураційного інтеграла, а саме — знехтувати його залежністю від k_i в кумулянтах в інтервалі $k_i \in [0, B]$, покладаючи $\mathfrak{M}_n(k_1, \dots, k_n) \approx \mathfrak{M}_n(0, \dots, 0) \equiv \mathfrak{M}_n(0)$. Це наближення виглядає обґрунтованим, оскільки при $k_i \leq B$ залежність кумулянтів від k є слабкою. На рис. 1 наведено криві для кумулянтів системи твердих сфер, коли \mathfrak{M}_3 та \mathfrak{M}_4 описуються виразами (7) та (8).

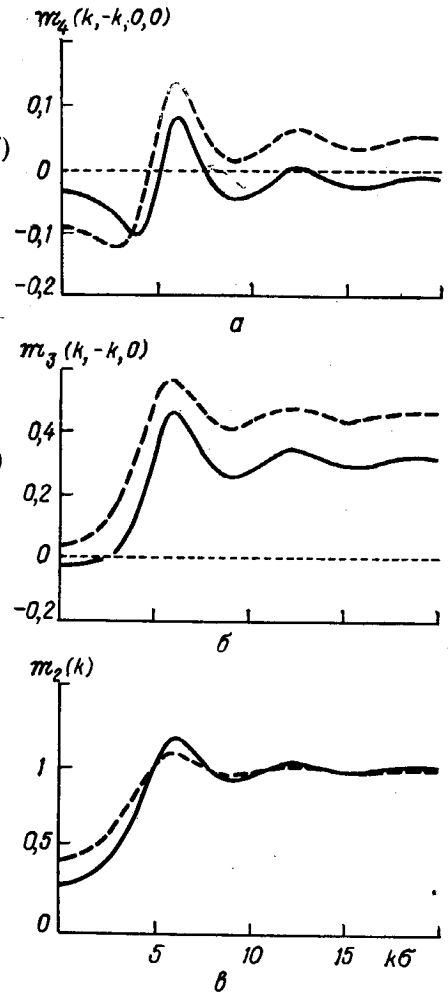


Рис. 1. Залежність кумулянтів системи твердих сфер від хвильового вектора та густини (штрихова крива — $\eta = 0,1$; суцільна — $\eta = 0,15$; діаметр сфери $\sigma = 3,38 \text{ \AA}$)

Нехтуючи також внеском в конфігураційний інтеграл від інтегрування за всіма $\omega_k, \rho_k, |\mathbf{k}| > B$ (поклавши $\tilde{\Phi}(k) = 0, |\mathbf{k}| > B$), замість (5) одержимо функціонал, заданий на блочній ґратці, для якої інтервал $[0, B]$ виконує роль зони Бріллюена. Далі можна скористатись методикою обчислення статистичної суми по шарах фазового простору колективних змінних, розвиненою у працях [9—11] для моделі Ізінга, та розрахувати вільну енергію і критичні індекси. Зокрема, для критичної густини знайдено $\eta = 0,13044$ [2], що співпадає з результатом, одержаним у праці [12].

Проте при застосуванні даного підходу у випадку реальної системи, якщо ставиться завдання розрахунку значень певних термодинамічних функцій і порівняння їх з експериментальними, виникають суттєві труднощі.

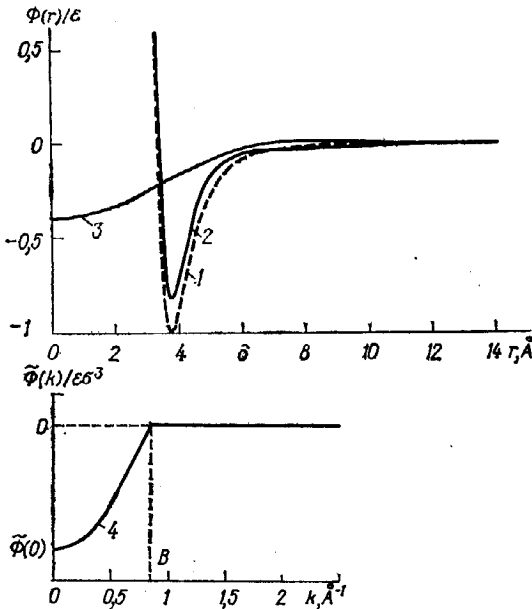


Рис. 2. Повний попарний потенціал для аргону (1), потенціал в системі відліку (2), «далекодіюча» частина попарного потенціалу (3), фур'є-образ «далекодіючої» частини потенціалу (4).

системи твердих сфер як системи відліку практично дуже складно.

Система відліку. Коротко зупинимось на умовах, які повинні задовольнятися при виборі системи відліку.

Як зазначалось у даній статті, обмежуємось врахуванням в експоненті (5) доданків до 4-го порядку включно. Таким чином, збіжність інтегралів за ω_k забезпечується, якщо кумулянт \mathfrak{M}_4 набуває від'ємні значення.

Як і у працях [1—3], будемо нехтувати залежністю від хвильових векторів у кумулянтах $\mathfrak{M}_3, \mathfrak{M}_4$. Для цього в інтервалі $[0, B]$ вона повинна бути достатньо слабкою. Очевидною умовою є також відсутність фазового переходу в самій системі відліку у всій досліджуваній області. Бажано також уникнути врахування внеску короткохвильових флуктуацій густини частинок, яким відповідають змінні $\rho_k, |\mathbf{k}| > B$.

У зв'язку з цим виберемо далекодіючу складову $\Phi(r)$ повного потенціалу $U(r)$ такою, щоб її фур'є-образ мав вигляд параболи (рис. 2, крива 4):

$$\tilde{\Phi}(k) = \begin{cases} \tilde{\Phi}(0)(1 - k^2/B^2), & k \leq B, \\ 0, & k > B. \end{cases} \quad (9)$$

Вибір величин $\tilde{\Phi}(0)$ та B повинен забезпечити виконання перерахованих вище вимог. Для точки B приймемо $B = \pi/R_0$, де R_0 — координата точки мінімуму потенціалу $U(r)$.

Потенціал взаємодії в системі відліку у цьому випадку одержується відніманням фур'є-орігіналу $\Phi(r)$ від повного потенціалу $U(r)$.

У даній статті виконаємо розрахунки для аргону, приймаючи для $U(r)$ вираз з праці [13]:

$$U(r) = \varepsilon \left\{ A e^{-a^*x + b^*x^2} - f \left[\frac{C_6}{x^6} + \frac{C_8}{x^8} + \frac{C_{10}}{x^{10}} \right] \right\}, \quad (10)$$

де $x = r/r_m$; $r_m = 3,761 \text{ \AA}$; $A = 1,13211845$; $a^* = 9,00053441$; $b^* = -2,60270226$; $C_6 = 1,09971113$; $C_8 = 0,54511632$; $C_{10} = 0,39278653$;

$$f = \begin{cases} \exp \left[- \left(\frac{d}{x} - 1 \right)^2 \right], & x < d; \\ 1, & x > d; \end{cases} \quad d = 1,04; \quad \varepsilon/k_B = 143,25 \text{ (K)}.$$

На рис. 2 показано криві для повного потенціалу (10), потенціалу системи відліку $\varphi(r)$ та фур'є-образу далекодіючої взаємодії $\Phi(k)$. Тут потенціал $\varphi(r)$ є осцилюючою при $r > R_0$ функцією міжчастинкової відстані r . Найявніть осциляцій пов'язана з обриванням потенціалу $\tilde{\Phi}(k)$ в точці $k = B$.

На відміну від випадку твердих сфер кореляційні функції системи відліку тепер невідомі, і тому наступним кроком є розв'язання рівняння Орнштейна — Церніке для потенціалу $\varphi(r)$

$$h(r) = C(r) - \rho \int C(r) h(r) dr, \quad (11)$$

де $h(r)$ — парна кореляційна функція; $C(r)$ — пряма кореляційна функція; $\rho = N/V$.

Відносно простий вигляд потенціалу $\varphi(r)$, а також відсутність особливостей у системі відліку в усій досліджуваній області дозволяють використати для розв'язку рівняння (11) метод протих ітерацій. Зовсім не будемо приділяти тут уваги питанню про точність і вибір наближення при пошуку розв'язку рівняння (11), і використаємо для замикання гіперланцюгове наближення. На рис. 3 і 4 наведено результати розрахунку кореляційних функцій та кумулянтів системи відліку для густини $\rho = \rho_{кр} = 0,531 \text{ г/см}^3$ та температури $T = 200 \text{ К}$ (критична температура $T_{кр} = 150,5 \text{ К}$). Кумулянт $\mathfrak{M}_2(k)$ розрахований згідно з формулою (6). Для обчислення старших кумулянтів за формулами (7), (8) в околі вибраного значення густини ρ проводилась серія аналогічних розрахунків зі зміщенням по густині $\Delta\rho \sim (0,01 \div 0,001)\rho$ і необхідні похідні обчислювались діленням відповідних різниць.

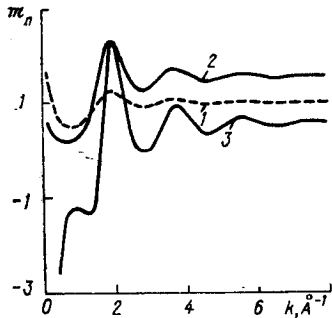


Рис. 4. Залежність кумулянтів системи відліку від хвильового вектора:

1 — $\mathfrak{M}_2(k)$; 2 — $\mathfrak{M}_3(k, -k, 0)$; 3 — $\mathfrak{M}_4(k, -k, 0, 0)$

Зауважимо, що кумулянт $\mathfrak{M}_2(k)$ при $k = 0$ (структурний фактор) пов'язаний зі стисливістю

$$\mathfrak{M}_2(0) = \frac{N}{V} k_B T \chi_T \quad (12)$$

і необмежено зростає при наближенні до області, де має місце $(\partial P / \partial \rho)_T = 0$. Оскільки в нашому випадку в системі відліку можливий фазовий перехід (хоч і поза досліджуваною областю), при пониженні температури $\mathfrak{M}_2(k)$ і пов'язані з ним кумулянти $\mathfrak{M}_3(k, -k, 0)$, $\mathfrak{M}_4(k, -k, 0, 0)$ при

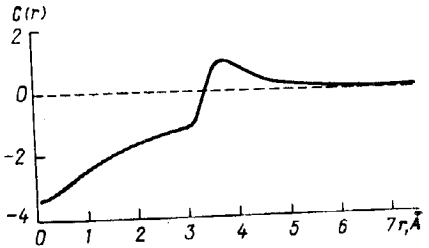


Рис. 3. Пряма кореляційна функція системи відліку

малих k будуть відносно швидко змінюватись, і нехтування їх залежністю від k в інтервалі $[0, B]$ буде вносити значну похибку.

У зв'язку з цим виконаємо в (5) наступну заміну змінних інтегрування:

$$\sqrt{\mathfrak{M}_2(k)} \omega_k = \omega'_k, \quad \sqrt{\mathfrak{M}_2(k)} \rho'_k = \rho_k. \quad (13)$$

Перепишемо вираз для конфігураційного інтеграла (5), враховуючи те, що при даному виборі потенціалу $\tilde{\Phi}(k)$ колективні змінні ρ_k , $|k| > B$, будуть відсутні, і переозначуючи символ Кронекера

$$\delta_k = \frac{1}{N_B} \sum_{\mathbf{R}_i} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_i}, \quad (14)$$

де \mathbf{R}_i — координати вузлів деякої блочної ґратки, що містить N_B комірок; N_B — кількість введених змінних ρ_k^c , ρ_k^s , причому

$$N_B = V \left(\frac{B}{\pi} \right)^3; \quad \frac{N_B}{N} = \rho^{-1} \left(\frac{B}{\pi} \right)^3. \quad (15)$$

Повертаючись до старих позначень ω_k , ρ_k , одержуємо

$$\begin{aligned} \Xi = & \Xi_{RS} \int \exp \left\{ \mu \sqrt{N \mathfrak{M}_2(0)} \rho_0 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, |\mathbf{k}| \leq B} |\alpha(\mathbf{k})| \mathfrak{M}_2(k) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \right\} \times \\ & \times \exp \left\{ -i2\pi \sqrt{N_B} \overline{\mathfrak{M}}_1 \omega_0 + i2\pi \sum_{\mathbf{k}, |\mathbf{k}| \leq B} \omega_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} - \frac{(2\pi)^2}{2} \sum_{\mathbf{k}, |\mathbf{k}| \leq B} \omega_{\mathbf{k}} \omega_{-\mathbf{k}} \right\} \times \\ & \times \exp \left\{ \frac{i(2\pi)^3}{3! \sqrt{N_B}} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, |\mathbf{k}_i| \leq B} \overline{\mathfrak{M}}_3(k_1, k_2, k_3) \omega_{\mathbf{k}_1} \omega_{\mathbf{k}_2} \omega_{\mathbf{k}_3} \delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3} \right\} \times \\ & \times \exp \left\{ \frac{(2\pi)^4}{4! N_B} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4, |\mathbf{k}_i| \leq B} \overline{\mathfrak{M}}_4(k_1, \dots, k_4) \omega_{\mathbf{k}_1} \dots \omega_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4} \right\} \times \\ & \times (d\omega)^{N_B} (d\rho)^{N_B}. \end{aligned} \quad (16)$$

Тут

$$\begin{aligned} \overline{\mathfrak{M}}_1 &= \sqrt{\frac{N}{N_B}} \frac{1}{\sqrt{\mathfrak{M}_2(0)}}, \quad \overline{\mathfrak{M}}_3(k_1, k_2, k_3) = \\ &= \sqrt{\frac{N}{N_B}} \frac{\mathfrak{M}_3(k_1, k_2, k_3)}{\sqrt{\mathfrak{M}_2(k_1) \mathfrak{M}_2(k_2) \mathfrak{M}_2(k_3)}}, \end{aligned} \quad (17)$$

$$\overline{\mathfrak{M}}_4(k_1, \dots, k_4) = \frac{N_B}{N} \frac{\mathfrak{M}_4(k_1, \dots, k_4)}{\mathfrak{M}_2(k_1) \mathfrak{M}_2(k_2) \mathfrak{M}_2(k_3) \mathfrak{M}_2(k_4)}.$$

На рис. 5 наведено криві для $\overline{\mathfrak{M}}_3(k, -k, 0)$ та $\overline{\mathfrak{M}}_4(k, -k, 0, 0)$. Бачимо, що при $k \rightarrow 0$ їх залежність від k значно слабша, порівняно з відповідними кривими на рис. 4.

Нехтуючи залежністю кумулянтів від k в інтервалі $k \in [0, B]$, приймаємо

$$\begin{aligned} \overline{\mathfrak{M}}_3(k_1, k_2, k_3) &\rightarrow \overline{\mathfrak{M}}_3(0, 0, 0) \equiv \overline{\mathfrak{M}}_3(0), \\ \overline{\mathfrak{M}}_4(k_1, \dots, k_4) &\rightarrow \overline{\mathfrak{M}}_4(0, 0, 0, 0) \equiv \overline{\mathfrak{M}}_4(0). \end{aligned} \quad (18)$$

У результаті одержимо наступну форму для статистичної суми:

$$\begin{aligned} \Xi = & \Xi_{RS} \int \exp \left\{ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, |\mathbf{k}| \leq B} |\alpha(\mathbf{k})| \mathfrak{M}_2(k) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} + \sqrt{N \mathfrak{M}_2(0)} \mu \rho_0 - \right. \\ & - i2\pi \sqrt{N_B} \overline{\mathfrak{M}}_1 \omega_0 + i2\pi \sum_{\mathbf{k}, |\mathbf{k}| \leq B} \omega_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} - \frac{(2\pi)^2}{2} \sum_{\mathbf{k}, |\mathbf{k}| \leq B} \omega_{\mathbf{k}} \omega_{-\mathbf{k}} + \\ & \left. + \frac{i(2\pi)^3}{3! \sqrt{N_B}} \overline{\mathfrak{M}}_3(0) \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, |\mathbf{k}_i| \leq B} \omega_{\mathbf{k}_1} \omega_{\mathbf{k}_2} \omega_{\mathbf{k}_3} \delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3} \right\} \times \\ & \times \exp \left\{ \frac{(2\pi)^4}{4! N_B} \overline{\mathfrak{M}}_4(0) \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4, |\mathbf{k}_i| \leq B} \omega_{\mathbf{k}_1} \dots \omega_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4} \right\} (d\omega)^{N_B} (d\rho)^{N_B}. \end{aligned} \quad (19)$$

Після інтегрування за ω_k одержимо

$$\Xi = \Xi_{RS} Q_m^{NB} \int \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{k, |k| \leq B} d_2(k) \rho_k \rho_{-k} + \sqrt{N} \overline{\mathfrak{M}}_2(0) \mu \rho_0 - a_1 \sqrt{N_B} \rho_0 \right\} \times \\ \times \exp \left\{ -\frac{a_3}{3! \sqrt{N_B}} \sum_{k_1, k_2, k_3, |k_i| \leq B} \rho_{k_1} \rho_{k_2} \rho_{k_3} \delta_{k_1+k_2+k_3} - \right. \\ \left. - \frac{a_4}{4! N_B} \sum_{k_1, \dots, k_4, |k_i| \leq B} \rho_{k_1} \dots \rho_{k_4} \delta_{k_1+\dots+k_4} \right\} (d\rho)^{NB}. \quad (20)$$

Тут

$$a_1 = -2\pi \left(\frac{2}{Q_m} \right) \int_0^\infty \omega F_s(\omega) d\omega;$$

$$a_2 = (2\pi)^2 \left(\frac{2}{Q_m} \right) \int_0^\infty \omega^2 F_c(\omega) d\omega + a_1^2;$$

$$a_3 = (2\pi)^3 \left(\frac{2}{Q_m} \right) \int_0^\infty \omega^3 F_s(\omega) d\omega + 3a_2 a_1 - a_1^3;$$

$$a_4 = -(2\pi)^4 \left(\frac{2}{Q_m} \right) \int_0^\infty \omega^4 F_c(\omega) d\omega + 4a_3 a_1 + 3a_2^2 - 6a_2 a_1^2 + a_1^4;$$

$$F_c(\omega) = \cos \left[2\pi \overline{\mathfrak{M}}_1 \omega - \frac{(2\pi)^3}{3!} \overline{\mathfrak{M}}_3(0) \omega^3 \right] \exp \left\{ -\frac{(2\pi)^2}{2} \omega^2 + \frac{(2\pi)^4}{4!} \overline{\mathfrak{M}}_4(0) \omega^4 \right\};$$

$$F_s(\omega) = \sin \left[2\pi \overline{\mathfrak{M}}_1 \omega - \frac{(2\pi)^3}{3!} \overline{\mathfrak{M}}_3(0) \omega^3 \right] \exp \left\{ -\frac{(2\pi)^2}{2} \omega^2 + \frac{(2\pi)^4}{4!} \overline{\mathfrak{M}}_4(0) \omega^4 \right\};$$

$$d_2(k) = a_2 + \alpha(k) \overline{\mathfrak{M}}_2(k) \equiv a_2 + \tilde{\alpha}(k);$$

$$Q_m = 2 \int_0^\infty F_c(\omega) d\omega.$$

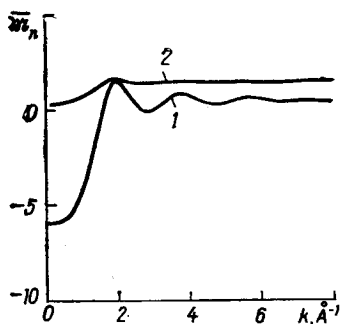


Рис. 5. Залежність величин $\overline{\mathfrak{M}}_3(k, -k, 0)$ (1) та $\overline{\mathfrak{M}}_2(k, -k, 0, 0)$ (2) від хвильового вектора ($\rho = 0,531$ г/см³, $T = 200$ К)

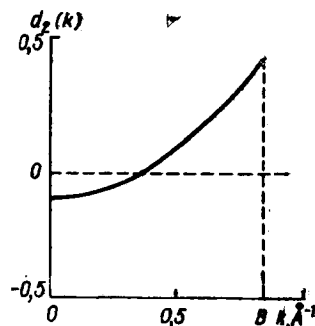


Рис. 6. Коефіцієнт $d_2(k)$ в околі критичної точки

Таким чином, маємо вихідний вираз для статистичної суми, записаний у формі (19) або у формі (20).

Розрахунок статистичної суми в області $T > T_c$. У даній праці розглядаємо область температур $T \geq T_c$, при яких система перебуває в однофазному стані. Вважаємо, що характерні для околу критичної точки закономірності тут не з'являються, а тому не будемо виділяти у статистичній сумі параметр порядку.

Методика обчислення виразів (19), (20) в околі критичної точки була розглянута у працях [9—11] і ґрунтується на застосуванні пошарового інтегрування фазового простору колективних змінних.

Коефіцієнт $d_2(k)$ при квадратичному за ρ_k доданку в (20) на відрізьку $k \in [0, B]$ в широкому температурному інтервалі приймає як додатні, так і від'ємні значення (рис. 6).

У процесі пошарового інтегрування при $T > T_c$ після кількох кроків інтегрування крива $d_2(k)$ повністю проходить вище осі абсцис [9]. Проте при $\tau = (T - T_c)/T_c \leq 0,01$ значення $d_2(0)$ від'ємне, але характерна для близького околу критичної точки симетрія підінтегральних функцій у виразі типу (20), які одержуються на різних кроках пошарового інтегрування, не має місця, і скористатись зі знайдених у праці [9] рекурентних формул для коефіцієнтів функцій розподілу не вдається. У наступних працях розглянемо техніку обчислення статистичної суми в області, близькій до околу критичної точки.

Ліквідуємо в (19) та (20) доданки в експоненті, пропорційні до ω^3 та ρ^3 , за допомогою замін змінних:

$$\omega_k = \tilde{\omega}_k + \frac{i}{2\pi} \sqrt{N_B} \delta_k \frac{\bar{\mathfrak{M}}_3(0)}{|\bar{\mathfrak{M}}_4(0)|}, \quad (21)$$

$$\rho_k = \tilde{\rho}_k + \delta_k \sqrt{N_B} \frac{a_3}{a_4}. \quad (22)$$

Замість (19) та (20) відповідно одержуємо

$$\begin{aligned} \Xi = & \Xi_{RS} \exp \left\{ -N_B \left[\frac{\bar{\mathfrak{M}}_3^2(0)}{2\bar{\mathfrak{M}}_4^2(0)} + \frac{5\bar{\mathfrak{M}}_3^4(0)}{24|\bar{\mathfrak{M}}_4(0)|^3} \right] \right\} \exp \left\{ \frac{1}{2} N_B |\tilde{\alpha}(0)| \tilde{\mathfrak{M}}_1^2 + \right. \\ & + \mu \sqrt{N N_B \mathfrak{M}_2(0)} \tilde{\mathfrak{M}}_1 \left. \right\} \int \exp \left\{ \sqrt{N_B} \mu^* \rho_0 - \frac{1}{2} \sum_{k, |k| \leq B} \tilde{\alpha}(k) \rho_k \rho_{-k} \right\} \times \\ & \times \exp \left\{ i2\pi \sum_{k, |k| \leq B} \omega_k \rho_k - \frac{(2\pi)^2}{2} \tilde{\mathfrak{M}}_2 \sum_{k, |k| \leq B} \omega_k \omega_{-k} \right\} \times \\ & \times \exp \left\{ -\frac{(2\pi)^4}{4! N_B} |\bar{\mathfrak{M}}_4(0)| \sum_{k_1, \dots, k_4, |k_i| \leq B} \omega_{k_1} \dots \omega_{k_4} \delta_{k_1 + \dots + k_4} \right\} (d\omega)^{N_B} (d\rho)^{N_B}, \quad (23) \end{aligned}$$

де

$$\tilde{\mathfrak{M}}_1 = \bar{\mathfrak{M}}_1 + \frac{\bar{\mathfrak{M}}_3(0)}{|\bar{\mathfrak{M}}_4(0)|} + \frac{\bar{\mathfrak{M}}_3^3(0)}{3\bar{\mathfrak{M}}_4^2(0)};$$

$$\mu^* = \mu \sqrt{\frac{N}{N_B} \mathfrak{M}_2(0) - \tilde{a}_1};$$

$$\tilde{a}_1 = \frac{\bar{\mathfrak{M}}_3(0)}{|\bar{\mathfrak{M}}_4(0)|} - |\tilde{\alpha}(0)| \tilde{\mathfrak{M}}_1; \quad \tilde{\mathfrak{M}}_2 = 1 + \frac{\bar{\mathfrak{M}}_3^2(0)}{2|\bar{\mathfrak{M}}_4(0)|}$$

або

$$\begin{aligned} \Xi = & \Xi_{RS} Q_m^{N_B} \sqrt{2}^{N_B-1} \exp \left\{ N_B \frac{a_3}{a_4} \left[a_1 - \frac{d_2(0) a_3}{2a_4} + \frac{a_3^3}{8a_4^2} \right] \right\} \times \\ & \times \exp \left\{ -\mu \frac{a_3}{a_4} \sqrt{N N_B \mathfrak{M}_2(0)} \right\} \int \exp \left\{ \sqrt{N_B} \hat{\mu} \rho_0 - \frac{1}{2} \sum_{k, |k| \leq B} \tilde{d}_2(k) \rho_k \rho_{-k} \right\} \times \\ & \times \exp \left\{ -\frac{a_4}{4! N_B} \sum_{k_1, \dots, k_4, |k_i| \leq B} \rho_{k_1} \dots \rho_{k_4} \delta_{k_1 + \dots + k_4} \right\} (d\rho)^{N_B}, \quad (24) \end{aligned}$$

тут

$$\hat{\mu} = \mu \sqrt{\frac{N}{N_B} \mathfrak{M}_2(0) - a_1 + \frac{a_3 d_2(0)}{a_4} - \frac{a_3^3}{3a_4^2}};$$

$$\tilde{d}_2(k) = a_2 - \frac{a_3^2}{2a_4} + \alpha(k) \mathfrak{M}_2(k).$$

Для розрахунку статистичної суми можна використати вираз (23) або (24). Наприклад, в області $T > T_c$, обмежуючись гауссовим наближенням

за змінними ω , в (23) одержуємо

$$\Xi = \Xi_{RS} \exp \left\{ -N_B \left[\frac{\bar{m}_3^2(0)}{2\bar{m}_4^2(0)} + \frac{5\bar{m}_3^4(0)}{24|\bar{m}_4(0)|^3} - \frac{1}{2} |\tilde{\alpha}(0)| \bar{m}_1^2 \right] \right\} \times \\ \times \exp \left\{ \mu \sqrt{N_B \bar{m}_2(0)} \bar{m}_1 + \frac{\mu^* N_B \bar{m}_2}{2(1 + \tilde{\alpha}(0) \bar{m}_2)} \right\} \prod_{k, |k| \leq B} (1 + \tilde{\alpha}(k) \bar{m}_2)^{-1/2}. \quad (25)$$

З умови $\partial \ln \Xi / \partial \mu = \bar{N}$ знаходимо

$$\mu^* = \frac{1 + \tilde{\alpha}(0) \bar{m}_2}{\bar{m}_2} \left(\sqrt{\frac{\bar{N}}{N_B \bar{m}_2(0)}} - \bar{m}_1 \right). \quad (26)$$

Для тиску в результаті одержуємо

$$P = P_{RS} + k_B T \left(\frac{B}{\pi} \right)^3 \left\{ - \left[\frac{\bar{m}_3^2(0)}{2\bar{m}_4^2(0)} + \frac{5\bar{m}_3^4(0)}{24|\bar{m}_4(0)|^3} \right] + \frac{1}{2} \bar{m}_1^2 |\tilde{\alpha}(0)| + \mu^* + \right. \\ \left. + a_1 - \frac{3}{2} \int_0^1 k^2 \ln [1 + \tilde{\alpha}(kB) \bar{m}_2] dk + \frac{\mu^{*2} \bar{m}_2}{2(1 + \tilde{\alpha}(0) \bar{m}_2)} \right\}. \quad (27)$$

Тут P_{RS} — тиск, зумовлений системою відліку, для обчислення якого скористаємося термічним рівнянням стану

$$P_{RS} = k_B T \frac{N}{V} - \frac{1}{6} \int_V dr |r| \varphi'(r) g_{RS}(r). \quad (28)$$

Значення радіальної функції розподілу $g_{RS}(r)$ для системи відліку одержуємо з розв'язку рівняння Орнштейна — Церніке, похідну $\varphi'(r)$ обчислюємо, використовуючи (10).

Вираз (24) в принципі еквівалентний виразу (23). Однак при виконанні числових розрахунків треба мати на увазі, що при обчисленні коефіцієнтів a_1, \dots, a_4 враховано обмежене число доданків в експоненті (19). Приймаючи

у виразі (24) $\tilde{\alpha}(k) = 0$, після інтегрування за всіма змінними ρ_k повинні були б одержати $\Xi = \Xi_{RS} q(\eta, T)$, причому $q(\eta, T) = 1$ при $\tilde{\alpha}(k) \equiv 0$.

Проте внаслідок згаданого наближення результат для $q(\eta, T)$ може бути відмінний від одиниці. Похибку, що виникає внаслідок цього, можна зменшити, відновивши нормування $q(\eta, T)|_{\tilde{\alpha}=0} = 1$. Це можна зробити, зокрема, зібравши всі множники, що виникають внаслідок інтегрування в статистичній сумі за ω_k і ρ_k , і прирівнявши їх добуток при $\tilde{\alpha}(k) = 0$ до одиниці.

Розглянемо температури, при яких має місце $\tilde{d}_2(0) > 0$. Скористаємось в (24) гауссовим наближенням, ігноруючи доданок в експоненті підінтегральної функції, пропорційний до a_4 . Після обчислення інтеграла за ρ_k і знаходження значення хімічного потенціалу μ згідно з умовою (26), здійснивши відновлення нормування для $q(\eta, T)$: $q(\eta, T)|_{\tilde{\alpha}(k)=0} = 1$, для тиску одержуємо простий вираз

$$P = P_{RS} + k_B T \left(\frac{B}{\pi} \right)^3 \left\{ \frac{1}{2} \ln \bar{a}_2 - \frac{N}{V} \left(\frac{\pi}{B} \right)^3 |\alpha(0)| - \frac{3}{2} \int_0^1 \ln \bar{d}_2(kB) k^2 dk \right\}. \quad (29)$$

При $\tilde{\alpha}(k) \equiv 0$ маємо $\bar{d}_2(kB) = \bar{a}_2 + \tilde{\alpha}(kB) \equiv \bar{a}_2$, отже, $P = P_{RS}$.

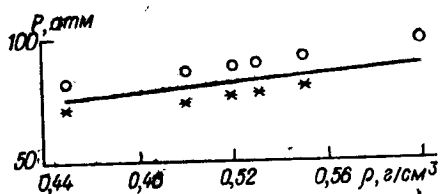


Рис. 7. Залежність тиску від густини для аргону при $T = 173$ К (суцільна крива — дані експерименту [15]; кружочки — розрахунки за формулою (27); зірочки — за формулою (35))

Виконаємо також обчислення статистичної суми згідно з виразом (24), наближено врахувавши доданок, пропорційний до a_4 , в доданку, квадратичному за ρ_k , тобто

$$\begin{aligned} & \frac{a_4}{4! N_B} \sum_{k_1, \dots, k_4, |k_i| \leq B} \delta_{k_1+k_2+k_3+k_4} \rho_{k_1} \rho_{k_2} \rho_{k_3} \rho_{k_4} \approx \\ & \approx \frac{a_4}{8N_B} \sum_{k_1, |k_1| \leq B} \langle \rho_{k_1} \rho_{k_1} \rangle \sum_{k, |k| \leq B} \rho_k \rho_{-k} = \frac{1}{2} A \sum_{k, |k| \leq B} \rho_k \rho_{-k}, \end{aligned} \quad (30)$$

де $A = a_4/4N_B \sum_{k, |k| \leq B} \langle \rho_k \rho_{-k} \rangle$ обчислюється самоузгоджено:

$$\frac{\partial \ln \Xi}{\partial A} = -\frac{1}{2} \sum_{k, |k| \leq B} \langle \rho_k \rho_{-k} \rangle. \quad (31)$$

Для статистичної суми одержимо

$$\begin{aligned} \Xi = & \Xi_{RS} Q_m^{N_B} \sqrt{2}^{N_B} \exp \left\{ N_B \frac{a_3}{a_4} \left[a_1 - \frac{d_2(0) a_3}{2a_4} + \frac{a_3^3}{8a_4^2} \right] \right\} \times \\ & \times \exp \left\{ -\mu \sqrt{NN_B \mathfrak{M}_2(0)} \frac{a_3}{a_4} + \frac{N_B \hat{\mu}^2}{2(\tilde{d}_2(0) + A)} \right\} \prod_{k, |k| \leq B} \sqrt{\frac{\pi}{A + \tilde{d}_2(k)}}. \end{aligned} \quad (32)$$

Згідно з (31), (32) маємо рівняння для A :

$$\frac{\hat{\mu}^2}{(\tilde{d}_2(0) + A)^2} + \frac{1}{N_B} \sum_{k, |k| \leq B} (\tilde{d}_2(k) + A)^{-1} = \frac{4A}{a_4}. \quad (33)$$

Умова (26) дає рівняння для хімічного потенціалу

$$\begin{aligned} -\sqrt{NN_B \mathfrak{M}_2(0)} \frac{a_3}{a_4} + \frac{N_B \hat{\mu}}{A + \tilde{d}_2(0)} - \left(\frac{N_B \hat{\mu}^2}{2(\tilde{d}_2(0) + A)^2} + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \sum_{k, |k| \leq B} (\tilde{d}_2(k) + A)^{-1} \right) \frac{\partial A}{\partial \mu} = N. \end{aligned} \quad (34)$$

Похідну $\partial A/\partial \mu$ визначаємо з рівняння (33) і, підставивши її в рівняння (34), обчислюємо хімічний потенціал $\hat{\mu}$.

Аналогічний розрахунок виконуємо для $\alpha(k) \equiv 0$. Враховуючи $\tilde{d}_2(k) = \tilde{a}_2$, розв'язуємо рівняння типу (33), (34) для цього випадку. Одержані значення $\hat{\mu}^0 \equiv \hat{\mu}(\alpha \equiv 0)$ і $A^0 = A(\alpha)(k) \equiv 0$ використаємо для відновлення нормування на одиницю добутку $q(\eta, T)$ у статистичній сумі. У результаті для тиску одержуємо рівняння

$$\begin{aligned} P = & P_{RS} + k_B T \left(\frac{B}{\pi} \right)^3 \left\{ \frac{a_3}{a_4} [\hat{\mu}^0 - \hat{\mu} + \hat{a}_1^0 - \hat{a}_1] + \right. \\ & \left. + \frac{\hat{\mu}^2}{2(\tilde{d}_2(0) + A)} - \frac{\hat{\mu}^{02}}{2(\hat{a}_2 + A^0)} - \frac{3}{2} \int_0^1 k^2 \ln \frac{\tilde{d}_2(kB) + A}{\tilde{a}_2 + A^0} dk \right\}, \end{aligned} \quad (35)$$

тут

$$\hat{a}_1 = a_1 - \frac{d_2(0) a_3}{a_4} + \frac{a_3^3}{3a_4^2}; \quad \hat{a}_1^0 = \hat{a}_1(\alpha \equiv 0).$$

При $\alpha(k) \equiv 0$, одержуємо $\hat{\mu} = \hat{\mu}^0$, $A = A^0$, $\hat{a}_1^0 = \hat{a}_1$, і в результаті $P|_{\alpha=0} = P_{RS}$.

Результати розрахунку тиску для аргону згідно з виразами (27), (35) показано на рис. 7. Звичайно, в області температур $T > T_c$ можна застосувати для розрахунку рівняння стану інші методи, які дають результати значно точніші, ніж тут наведено. Проте в даній праці ми лише проілюстрували ідею виділення реалістичної системи відліку і далекодіючого при-

тягання, яке може привести до фазового переходу, і розглянули деякі питання, які при цьому виникають. Розрахунок же як структурних характеристик системи відліку, так і статистичної суми в цілому може бути виконаний з більшою точністю. Метою даного підходу є його наступне застосування в області $T < T_c$ та в околі критичної точки, дослідження параметра порядку та розрахунок критичних індексів для реальних речовин. Метод колективних змінних при цьому створює суттєві зручності, оскільки сукупність змінних містить змінну ρ_0 , що безпосередньо пов'язана з параметром порядку.

1. Юхновский И. Р., Идзик И. М., Коломиец В. А. Постановка задачи о критической точке системы жидкость — газ в методе коллективных переменных. — Киев, 1987. — 29 с. — (Препр./ АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-87-16Р).
2. Юхновский И. Р., Идзик И. М., Коломиец В. А. Свободная энергия системы жидкость — газ в методе коллективных переменных. — Киев, 1987. — 32 с. — (Препр./ АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-87-15Р).
3. Юхновский И. Р. Функционал статистической суммы в большом каноническом ансамбле с выделенной системой отсчета. — Киев, 1988. — 23 с. — (Препр./ АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-88-30Р).
4. Юхновский И. Р., Головкин М. Ф. Статистическая теория классических равновесных систем. — Киев : Наук. думка, 1980. — 372 с.
5. Идзик И. М., Коломиец В. А. Термодинамика системы с дальнедействующими и короткодействующими межчастичными взаимодействиями в гауссовом приближении. — Киев, 1986. — 21 с. — (Препр./ АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-86-134Р).
6. Wertheim M. S. Exact solution of the Percus—Yevick integral equation for hard spheres // Phys. Rev. Lett. — 1963. — 10, N 8. — P. 321—323.
7. Barker J. A., Henderson D. Perturbation theory and equation of state for fluids. II. A successful theory of liquids // J. Chem. Phys. — 1967. — 47, N 11. — P. 4714—4721.
8. Weeks E. D., Chandler D., Andersen H. C. Role of repulsive forces in determining the equilibrium structure of simple liquids // Ibid. — 1971. — 54, N 12. — P. 5237—5246.
9. Юхновский И. Р. Фазовые переходы второго рода. Метод коллективных переменных. — Киев : Наук. думка, 1985. — 223 с.
10. Юхновский И. Р., Козловский М. П. Решение задачи о фазовом переходе в трехмерной модели Изинга // Проблемы физической кинетики и физики твердого тела. — Киев : Наук. думка, 1990. — С. 424—443.
11. Козловский М. П., Пылюк И. В., Коломиец В. А. Численное исследование статистической суммы трехмерной модели Изинга на основе шестерного базисного распределения. — Киев, 1984. — 41 с. — (Препр./ АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-84-177Р).
12. Misawa M. Effective diameter of molecules and liquid — gas critical point // J. Chem. Phys. — 1990. — 93, N 11. — P. 8401—8402.
13. Aziz R. A., Slaman M. J. The repulsive wall of the Ar—Ar interatomic potential reexamined // Ibid. — 92, N 2. — P. 1030—1035.
14. Peters C. J., Lichtenthaler R. N. Calculation of thermodynamic properties from a parametric integral equation // Physica A. — 1989. — 156. — P. 417—435.
15. Варгафтик Н. Б. Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей. — М. : Наука, 1972. — 720 с.

Інститут фізики конденсованих систем
АН України, Львів

Одержано 9.07.92

УДК 537.31.311; 536.75

**М. В. ВАВРУХ, Н. М. ВАВРУХ,
Т. Є. КРОХМАЛЬСЬКИЙ, В. Б. СОЛОВ'ЯН**

РОЗРАХУНОК ПОПРАВКИ НА ЛОКАЛЬНЕ ПОЛЕ МОДЕЛІ ВЗАЄМОДІЮЧОГО ЕЛЕКТРОННОГО ГАЗУ БАЗИСНИМ МЕТОДОМ

- На основі розвинутого авторами базисного підходу досліджено одну з фундаментальних характеристик моделі взаємодіючого виродженого електронного газу — поправку на локальне поле — в різних областях параметра неідеальності. Знайдено чисельні розв'язки системи нелінійних інтегральних рівнянь, що визначають цю функцію як у статичному, так і в динамічному випадках. Показано, що має місце зміна форми статичної поправки на локальне поле в околі точки $q_0 = 2k_F$ залежно від параметра неідеальності: пік у випадку слабо неідеального систем, монотонна поведінка в області густин, що відповідають металам, а також для меншої густини. З метою тестування знайдених розв'язків виконано розрахунки важливих енергетичних та структурних характеристик основного стану моделі.

© М. В. Ваврух, Н. М. Ваврух, Т. Є. Крохмальський, В. Б. Солов'ян, 1993