

УДК 536.758

Е. В. Фарафонтова, ассист., канд. физ.-мат. наук;
 И. И. Наркевич, проф., д-р физ.-мат. наук;
 В. Б. Клышко, студ.
 (БГТУ, г. Минск)

СХОДИМОСТЬ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ СИСТЕМЫ ДВУХ ИНТЕГРАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ ДЛЯ ПОТЕНЦИАЛОВ СРЕДНИХ СИЛ МАЛОЙ ПОДСИСТЕМЫ МОЛЕКУЛ ВО ВНЕШНЕМ ПОЛЕ ОДНОРОДНОЙ СРЕДЫ

При определении энергии выделенной молекулы, находящейся в микроячейке, ω_i метода условных распределений всю макроскопическую систему из N молекул в объеме V делим на две подсистемы. В первой малой подсистеме внутри сферы радиуса b молекулы распределены в микроячейках, центры которых принадлежат двум первым (относительно центра микроячейки ω_i) координационным сферам с номерами $m = 1, 2$. Оставшаяся часть системы рассматривается как внешняя подсистема в виде сплошной среды, которая создает молекулярное поле с потенциалом $\varphi(x)$, рассчитываемым в приближении среднего поля по принципу суперпозиции.

Для потенциалов средних сил φ_m , ρ_m , описывающих взаимодействие молекулы в ω_i с молекулами, распределенными в микроячейках двух первых координационных сфер, используем интегральные уравнения двухуровневого молекулярно-статистического подхода:

$$\exp \left\{ - \int_{\omega_i} \rho_m(\vec{q}) \varphi_m(\vec{q}) d\vec{q} - \int_{\omega_i} \rho_m(\vec{q}) \varphi(\vec{q}) d\vec{q} \right\} + \frac{1}{n} \int_{\omega_i} \rho_m(\vec{q}) \varphi_m(\vec{q}) d\vec{q} = \varphi_m(\vec{q}_i), \quad m = 1, 2 \quad (1)$$

Здесь вспомогательные функции распределения $\hat{F}_{11}^{*m}(\vec{q}_i)$ выражаются через искомые потенциалы φ_m и потенциал $\varphi(x)$ поля внутри полости радиуса b .

Сходимость итерационного процесса контролировалась с помощью относительных погрешностей ε_m ($m = 1, 2$) двух последовательных решений интегральных уравнений. Процесс численного решения заканчивался, если относительные погрешности ε_m оказывались равны или меньше 10^{-3} . Необходимое для этого число итераций зависит от вида используемых пробных функций, и составляет около 10–15 итераций в области гомогенного состояния вещества (вблизи фазовых переходов необходимое число итераций увеличивалось).