УДК 531.19

Г. С. Бокун, доц., канд. физ.-мат. наук;
В. С. Вихренко, проф., д-р физ.-мат. наук
(БГТУ, г. Минск)

ЗАМЫКАНИЕ ЦЕПОЧКИ ББГКИ ДЛЯ СЛУЧАЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО СОСТОЯНИЯ С УЧЕТОМ КУЛОНОВСКОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Рассматривая систему N частиц в объеме V, для унарной и бинарной функций распределения используем представления

$$F_1(i)=\frac{1}{NQ_i}\exp\left(-\beta\varphi(i)\right)=\frac{1}{N}\rho_1(i), \tag{1}$$

$$F_2(i,j)=\frac{\exp\left(-\beta\left(\varphi(i)+\varphi(j)+\Phi(i,j)\right)\right)}{\int\limits_V\int\limits_V \exp\left(-\beta\left(\varphi(i)+\varphi(j)+\Phi(i,j)\right)\right)dq_i dq_j}=\frac{\rho_2(i,j)}{N^2}. \tag{2}$$

где $\Phi(i,j)$ – межчастичный потенциал с учетом кулоновского взаимодействия, $\varphi(i)$ – потенциал средней силы, действующей на частицу в точке q_i, β – обратная температура.

Введем в рассмотрение майероподобные функции

$$f(i,j)=\exp\left(-\beta\Phi(i,j)\right)-1. \tag{3}$$

С учетом определения (3) и периодичности функции $\varphi(i)$ перепишем знаменатель в соотношении (2) в виде

$$Q_2=\int\limits_V\int\limits_V \exp\left(-\beta\varphi(i)\right)\exp\left(-\beta\varphi(j)\right)dq_i dq_j+\int\limits_V \exp\left(-\beta\varphi(i)\right)L(i)\,dq_i, \tag{4}$$

где

$$L(i)=\frac{1}{Q_i}\int\limits_V f(i,j)\exp\left(-\beta\varphi(j)\right)dq_j. \tag{5}$$

Периодичность функции $\varphi(j)$ порождает периодичность $L(i)$. В итоге, используя цепочку уравнений для частичных функций распределения (1), (2), получим окончательно интегральное уравнение

$$-\beta\varphi(i)=\frac{1}{Q_j}\int\limits_V \exp\left(-\beta\varphi(j)\right)f(i,j)\,dq_j. \tag{6}$$

Соотношение (6) определяет потенциалы средних сил в кристаллическом состоянии для случая кулоновских систем.