

## ЛИТЕРАТУРА

1. Ortega R., Yu T. Robustness of adaptive controllers : A survey// Automatica.1989.Vol. 25 №5.
2. Smith R.S., Doule J.C. Model validation: A connection between robust control and identification //IEEE Trans. Automatic Control.1992.Vol. 37 №7.
3. Van den Hof P.M.J. Schrama R.J.P. Identification and control-closed-loop issues//Automatica.1995 Vol.31 №12
4. Кендалл М.Дж., Стьюарт А. Теория распределений. М.: Наука, 1966.
5. Льюнг.Л. Идентификация систем. Теория для пользователя. М.: Наука, 1991
6. Цыпкин Я.З. Основы информационной теории идентификации. М.:Наука, 1984
7. Хьюбер П. Робастность в статистике. М.: Мир, 1984.

УДК 531.19

Г.С. Бокун, доцент;  
 В.С. Вихренко, профессор;  
 К.Убинг, вед. научн. сотр.

### СТАТИСТИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА ДВУМЕРНОГО РЕШЕТОЧНОГО ГАЗА В САМОСОГЛАСОВАННОМ ДИАГРАММНОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

The selfconsistent diagram approximation for lattice systems is proposed. The free energy of the system is represented by diagram expansion with averaging over states of a reference system. The latter is defined by one-particle mean potentials, which are calculated on the basis of extremity principle. As an example numerical computations for two-dimensional square lattice with attractive interaction between nearest neighbors were carried out. The critical temperature, the coexistence curve, the chemical potential and probabilities for two nearest neighbor lattice sites to be occupied by particles or vacancies coincide within one per cent with exact or Monte Carlo data.

#### 1. Введение

Решеточные системы рассматриваются как модели многих физических, механических, информационных и т. п. процессов. Они отражают многие свойства дефектных структур в ионных кристаллах и твердых растворах, адсорбированных на поверхностях частиц [1 - 5]. Во многих приложениях твердые электролиты также могут моделироваться взаимодействующим решеточным газом со случайно распределенными или одинаковыми потенциалами в узлах решетки [6, 7].

Знание равновесных свойств решеточных систем, включая вероятности распределения частиц по узлам решетки (аналоги функций распределения для систем в непрерывном физическом пространстве), необходимо и для понимания неравновесных процессов. Например, известно выражение для коэффициента диффузии через химический потенциал и вероятность двум соседним узлам быть вакантными [4, 8].

Приближения среднего поля являются наиболее простыми и известными подходами к исследованию равновесных свойств решеточных систем. Они используются в вариантах молекулярного среднего поля Брэгга - Вильямса или приближения Бете - Пайерлса (квазихимического). Эти приближения позволяют дать качественное описание некоторых свойств решеточных систем, но их точность недостаточна для количественного исследования.

В данной работе введена в рассмотрение базисная система, свойства которой определяются средними потенциалами. Свободная энергия исследуемой решеточной системы представлена в виде диаграммного разложения с использованием усреднения по состояниям базисной системы. Самоогласованные уравнения для средних потенциалов вытекают из требования минимизации отбрасываемого остатка в диаграммном разложении свободной энергии. Предлагаемая методика иллюстрируется на примере системы с притяжением между ближайшими соседями.

## 2. Вариационный подход к построению приближенного описания системы

Рассмотрим плоскую квадратную решетку из  $N$  узлов, содержащую  $n$  частиц. Энергия парного взаимодействия в такой системе

$$U_N = \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N J_{ij} n_i n_j = \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \Phi_{n_i n_j}^{(ij)}, \quad (1)$$

где  $n_i, n_j$  - числа заполнения  $i$ -го и  $j$ -го узлов решетки (0 или 1),  $J_{ij}$  - энергия взаимодействия частиц, расположенных в этих узлах. Суммирование выполняется по всем узлам решетки при условии сохранения числа частиц (рассмотрение ведется в каноническом ансамбле):

$$\sum_{i=1}^N n_i = n. \quad (2)$$

Для сокращения обозначений удобно ввести величину

$$\Phi_{n_i n_j}^{(k)} = \Phi_{n_i n_j}^{(ij)} n_i n_j = J_k n_i n_j, \quad (3)$$

принимающую значение энергии взаимодействия между частицами, если  $n_i = n_j = 1$ , и равную нулю в остальных случаях, т.е. если хотя бы один из узлов  $i, j$  вакантен. Здесь межчастичное взаимодействие выражено через константу взаимодействия  $J_k$  соседей различного порядка  $k=1, 2, \dots$ , причем  $k=1$  соответствует ближайшим соседям,  $k=2$  - вторым соседям и т.д.

Наряду с реальной решеточной системой рассмотрим так называемую базисную систему, потенциальная энергия которой описывается одночастичными средними потенциалами  $\varphi_j(n_i)$  взаимодействия частицы ( $n_i=1$ ) или вакансии ( $n_i=0$ ), расположенными в узле  $i$ , с узлом  $j$  решетки:

$$U_N^{(0)} = \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \varphi_j(n_i). \quad (4)$$

Предполагается, что средние потенциалы базисной системы будут определяться через характеристики исходной системы на основе вариационного принципа.

Статистическая сумма исходной системы

$$Q_N = \text{Sp}_{\{n_1, \dots, n_N\}} \{ \exp(-\beta U_N) \}, \quad (5)$$

где операция  $\text{Sp}_{\{n_1, \dots, n_N\}}$  обозначает суммирование по всевозможным распределениям  $n$  частиц по  $N$  узлам решетки при выполнении условия (2) и  $\beta = (k_B T)^{-1}$  - обратная температура, может быть тождественно представлена как результат усреднения экспоненты потенциальной энергии по состояниям базисной системы при любом выборе средних потенциалов  $\varphi_j(n_i)$ :

$$Q_N = Q_N^{(0)} \langle \exp(-\beta U_N) \rangle_0. \quad (6)$$

Здесь статистическая сумма базисной системы

$$\begin{aligned} Q_N^{(0)} &= \text{Sp}_{\{n_1, \dots, n_n\}} \left\{ \exp(-\beta U_N^{(0)}) \right\} = \\ &= \text{Sp}_{\{n_1, \dots, n_n\}} \left\{ \prod_{i=1}^N \exp \left( -\beta \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \varphi_j(n_i) \right) \right\} = \left( \prod_{\alpha=0}^1 (Q_\alpha / c_\alpha)^{c_\alpha} \right)^N \end{aligned} \quad (7)$$

выражена через парциальные статистические суммы, отнесенные к одному узлу:

$$Q_{n_i} = \exp \left( -\beta \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \varphi_j(n_i) \right); \quad (8)$$

$$c_1 = n / N, \quad c_0 = (N - n) / N = 1 - c_1. \quad (9)$$

Благодаря одночастичной структуре потенциальной энергии (4) базисной системы усреднение по ее состояниям сводится к суммированию соответствующих величин с весовыми множителями, равными концентрации частиц ( $c_1$ ) или вакансий ( $c_0$ ):

$$\langle A_{mkl\dots} \rangle_0 = \sum_{m,k,l,\dots} A_{mkl\dots} c_m c_k c_l \dots \quad (10)$$

Здесь и далее нижние латинские индексы несут признаки узлов и чисел заполнения одновременно.

Входящие в (6) средние по базисной системе выразим через функции майеровского типа

$$f_{ij} = \exp \left\{ -\beta \left[ \Phi_{ij} - \varphi_j(n_i) - \varphi_i(n_j) \right] \right\} - 1; \quad (11)$$

$$\langle \exp(-\beta U_N) \rangle_0 = \left\langle \prod_{i=1}^N \prod_{j=i+1}^N (1 + f_{ij}) \right\rangle_0. \quad (12)$$

В результате для свободной энергии системы, отнесенной к одному узлу, получим диаграммное представление [9]

$$F = \frac{k_B T}{N} \ln Q_N = F_0 + 1/2 \text{---} \bullet \text{---} + 1/2 \text{---} \nearrow + 1/6 \text{---} \triangle + 1/8 \text{---} \square + 1/4 \text{---} \text{---} \square + \dots \quad (13)$$

Записанное соотношение (13) является стандартным по отношению к функциям (11). Однако последние включают средние потенциалы, и, таким образом, каждое слагаемое в (13) зависит от выбора этих потенциалов. Вместе с тем свободная энергия (13) инвариантна по отношению к их выбору. Последним обстоятельством можно воспользоваться для построения процедуры конструирования средних потенциалов в соответствии с принципом экстремальности.

Принимая во внимание несколько первых членов разложения (13), потребуем экстремальности отбрасываемого остатка. Ввиду инвариантности всего ряда по отношению к выбору средних потенциалов это требование эквивалентно условию экстремальности удерживаемой части ряда по отношению к варьированию средних потенциалов.

### 3. Квазихимическое приближение

Введем обозначения для экспонент межчастичных и средних потенциалов:

$$\exp(-\beta\Phi_{ij}^{(k)}) = W_{ij}^{(k)}, \quad \exp(-\beta\phi_j(n_i)) = X_i^{(k)}. \quad (14)$$

Здесь нижние индексы принимают значения 0 или 1, а верхние индексы обозначают степень соседства узлов  $i$  и  $j$ . Ввиду трансляционной инвариантности решетки эти величины не зависят от конкретного выбора узлов и всецело отделяются числами заполнения  $i$  и  $j$  и индексом соседства  $k$ . В некоторых случаях одному и тому же расстоянию между узлами  $i$  и  $j$  будут соответствовать несколько взаимных конфигураций, не переходящих друг в друга при преобразованиях группы точечной симметрии квадратной решетки. В таких случаях можно условно их рассматривать как узлы, имеющие разный порядок соседства, или предполагать, что их можно рассматривать как узлы одного и того же порядка соседства.

В результате для свободной энергии базисной системы получим

$$\frac{1}{k_B T} F_0 = - \sum_{i=0}^1 c_i \ln c_i + \sum_{i=0}^1 c_i \ln \prod_{k=1}^{\infty} (X_i^{(k)})^{z_k}, \quad (15)$$

где  $z_k$  - координационное число соседей  $k$ -го порядка. Например,  $z_k=4$  для  $k=1,2,3,5,6,9$  и  $z_k=8$  для  $k=4,7,8$ .

Каждая из диаграмм в (13) может быть представлена суммой диаграмм на узлах разного взаимного соседства. Так, для второй диаграммы находим

$$\bullet \text{---} \bullet = \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{j=0}^1 \left[ \left( \frac{W_{ij}^{(k)}}{X_i^{(k)} X_j^{(k)}} - 1 \right) c_i c_j \right]^{z_k}. \quad (16)$$

Учитывая вклад именно этих двух членов ( $F_0$  и  $(1/2) \bullet \text{---} \bullet$ ) в свободную энергию (13), из условия экстремальности

$$\left( \frac{\partial F}{\partial X_i^{(k)}} \right)_{c_\alpha} = 0 \quad (17)$$

находим определяющие уравнения для средних потенциалов

$$X_i^{(k)} = \sum_{j=0}^1 \frac{W_{ij}^{(k)} c_j}{X_j^{(k)}}, \quad k = 1, 2, \dots \quad (18)$$

Решение уравнений (18) представим в виде

$$X_0^{(k)} = \sqrt{c_0 + c_1 / \eta_k}, \quad X_1^{(k)} = X_0^{(k)} \eta_k, \quad (19)$$

где  $\eta_k$  - положительный корень уравнения

$$\eta_k^2 + \frac{c_1 - c_0}{c_0} \eta_k - W_k c_1 / c_0 = 0, \quad (20)$$

$$W_k = W_{11}^{(k)} = \exp(-\beta J_k), \quad (21)$$

то есть

$$\eta_k = -\frac{c_1 - c_0}{2c_0} + \sqrt{\left(\frac{c_1 - c_0}{2c_0}\right)^2 + \frac{c_1}{c_0} W_k}. \quad (22)$$

Полагая  $W_k=1$  при  $k \geq 2$ , приходим к квазихимическому приближению для решеточного газа со взаимодействием ближайших соседей [10]. При  $W_k \neq 1$  для  $k \geq 2$  получим обобщение квазихимического приближения для системы со взаимодействием более далеких соседей.

Отметим, что условия экстремальности (17) приводят к выражениям (18), эквивалентным равенству нулю вклада в свободную энергию системы, обусловленного диаграммой  $\bullet \text{---} \bullet$ . Для свободной энергии справедливо соотношение (15) с величинами  $X_i^{(k)}$ , определенными в соответствии с (19), (22).

Соотношения (18) показывают, что радиус действия средних потенциалов совпадает с радиусом действия межчастичного потенциала. При  $W_{ij}^{(k)}=1$ , что соответствует условию  $J_k=0$ , решением уравнения (18) является  $X_i^{(k)}=1$  или  $\varphi_j(n_i)=0$  для узлов  $i$  и  $j$ , образующих пару соседей  $k$ -го порядка. Ограничимся учетом взаимодействия только ближайших соседей.

Используя найденные средние потенциалы, можно последовательно учесть младшие диаграммы разложения (13). При этом нужно иметь в виду, что отличный от нуля вклад дают замкнутые диаграммы, содержащие только связи между ближайшими соседями. Ввиду этого, например, треугольная диаграмма не дает вклад в свободную энергию. В результате, группируя диаграммы по количеству узлов и учитывая только связи между ближайшими соседями, запишем

$$F = F_0 + \Delta f_4 + \Delta f_6 + \Delta f_7 + \Delta f_8 + \dots, \quad (23)$$

где нижний индекс при  $\Delta f$  указывает количество узлов, на которых определена соответствующая диаграмма.

Для четырехузловой диаграммы получим

$$\square = \sum_{i=0}^1 \sum_{j=0}^1 c_i c_j A_{ij}^2, \quad (24)$$

где

$$A_{ij} = \sum_{k=0}^1 c_k \left( \frac{W_{ik}^{(1)}}{X_i^{(1)} X_k^{(1)}} - 1 \right) \left( \frac{W_{jk}^{(1)}}{X_j^{(1)} X_k^{(1)}} - 1 \right) = B_{ij} - 1, \quad (25)$$

$$B_{ij} = \sum_{k=0}^1 \frac{c_n W_{ik}^{(1)} W_{jk}^{(1)}}{X_i^{(1)} X_j^{(1)} (X_k^{(1)})^2}. \quad (26)$$

Здесь индексы  $i$  и  $j$  соответствуют паре узлов, расположенных по диагонали квадрата, а индекс  $k$  - узлу между ними. Принимая во внимание (18), находим

$$\Delta f_4 = \sum_{i=0}^1 \sum_{j=0}^1 c_i c_j B_{ij}^2 - 1. \quad (27)$$

Аналогично могут быть подсчитаны вклады других диаграмм.

#### 4. Учет дальних межчастичных корреляций

Как отмечалось выше, система уравнений (18) приводит к средним потенциалам, радиус действия которых равен радиусу действия межчастичного потенциала. Это означает, что и межчастичные корреляции могут быть учтены лишь для расстояний, не превышающих радиус межчастичного взаимодействия. Для учета более далеких корреляций в варьируемую часть ряда (13) необходимо включить дополнительные диаграммы. В первую очередь к таким диаграммам следует отнести те, которые содержат одну связь между вторыми соседями (таким связям на диаграммах соответствуют наклонные линии), в то время как учитываются взаимодействия лишь между ближайшими соседями.

Варьируемая часть ряда явно представлена в выражении (13).  $F_0$  определяется соотношением (15) при учете двух первых сомножителей под знаком произведения ( $k=1,2$ ).

Варьирование (28) по  $X_i^{(1)}$  приводит к уравнению (18) для этой величины. Для варьирования по  $X_i^{(2)}$  подсчитаем сумму трех последних диаграмм в (13). Используя соотношения (24) - (26), находим

$$\text{---} \cdot \text{---} = \sum_{i=0}^1 \sum_{j=0}^1 \left( \frac{W_{ij}^{(2)}}{X_i^{(2)} X_j^{(2)}} - 1 \right) c_i c_j; \quad (28)$$

$$\text{---} \triangle \text{---} = \sum_{i=0}^1 \sum_{j=0}^1 \left( \frac{W_{ij}^{(2)}}{X_i^{(2)} X_j^{(2)}} - 1 \right) (B_{ij} - 1) c_i c_j; \quad (29)$$

$$\text{---} \square \text{---} = \sum_{i=0}^1 \sum_{j=0}^1 \left( \frac{W_{ij}^{(2)}}{X_i^{(2)} X_j^{(2)}} - 1 \right) (B_{ij} - 1)^2 c_i c_j. \quad (30)$$

С учетом этих диаграмм для свободной энергии запишем

$$\begin{aligned} \frac{1}{k_B T} F = & - \sum_{i=0}^1 c_i \ln c_i + \sum_{i=0}^1 c_i \ln \prod_{k=1}^2 (X_i^{(k)})^{z_k} + \\ & + 8 \sum_{i=0}^1 \sum_{j=0}^1 \left( \frac{W_{ij}^{(1)}}{X_i^{(1)} X_j^{(1)}} - 1 \right) c_i c_j + 2 \sum_{i=0}^1 \sum_{j=0}^1 \left( \frac{W_{ij}^{(2)}}{X_i^{(2)} X_j^{(2)}} - 1 \right) B_{ij}^2 c_i c_j + \dots \end{aligned} \quad (31)$$

Варьируя это выражение по  $X_i^{(2)}$ , получим

$$\frac{1}{k_B T} \frac{\partial F}{\partial X_\alpha^{(2)}} = \frac{4c_\alpha}{X_\alpha^{(2)}} - \frac{4c_\alpha}{(X_\alpha^{(2)})^2} \sum_{j=0}^1 \frac{W_{\alpha j}^{(2)}}{X_j^{(2)}} B_{\alpha j}^2 c_j. \quad (32)$$

Приравнявая нулю производную свободной энергии, приходим к уравнению, определяющему средние потенциалы вторых соседей:

$$X_\alpha^{(2)} = \sum_{j=0}^1 \frac{W_{ij}^{(2)}}{X_j^{(2)}} B_{\alpha j}^2 c_j. \quad (33)$$

С учетом (18) и (33) получим выражение для свободной энергии

$$F = F_0 + 2 \sum_{i=0}^1 \sum_{j=0}^1 \left( \frac{W_{ij}^{(2)}}{X_i^{(2)} X_j^{(2)}} - 1 \right) B_{ij}^2 c_i c_j + \dots \quad (34)$$

Соотношение (33) может быть также представлено как

$$\sum_{i=0}^1 \sum_{j=0}^1 \frac{c_i c_j B_{ij}^2}{X_i^{(2)} X_j^{(2)}} = 1. \quad (35)$$

С учетом этого выражение (34) упрощается:

$$F = F_0 + 2 \left( 1 - \sum_{i=0}^1 \sum_{j=0}^1 B_{ij}^2 c_i c_j \right) + \dots, \quad (36)$$

или, учитывая (27),

$$F = F_0 - \square + \Delta f^{(2)} + \Delta f_6 + \Delta f_7 + \Delta f_8 + \dots \quad (37)$$

Здесь  $\Delta f^{(2)}$  учитывает диаграммы, включающие связи между вторыми соседями. Непосредственные вычисления показали, что вклад этих слагаемых невелик.

### 5. Результаты вычислений и их обсуждение

Свободная энергия базисной системы хорошо воспроизводит диаграмму равновесия решеточного газа со взаимодействием ближайших соседей, полученную моделированием по методу Монте Карло [11, 12]. Учет  $\Delta f_4$  существенно ухудшает результаты, однако последующий учет  $\Delta f_6$ ,  $\Delta f_7$ ,  $\Delta f_8$ , ... снова постепенно улучшает результаты вычислений. Учитывая, что  $\Delta f_6 / \Delta f_4 \cong 0,7$  в широкой области изменения концентраций ( $0,2 \leq c \leq 0,8$ ), для свободной энергии принимаем выражение

$$F = F_0 - 0,25 \square. \quad (38)$$

Этому соотношению соответствует приведенная на рис. 1 диаграмма фазового перехода первого рода решеточный газ - решеточная жидкость, практически не отличающаяся от полученной моделированием по методу Монте-Карло. На этом же рисунке показаны результаты расчета фазовой диаграммы в кластерном приближении [13]. Кластеру  $1 \times 1$  соответствует обычное квазихимическое приближение. Из рисунка следует, что с увеличением размера кластера вид фазовой диаграммы постепенно изменяется от соответствующего квазихимическому приближению к получаемому моделированием по методу Монте Карло. Однако при  $k \geq 3$  изменение формы диаграммы становится медленным. Самосогласованное кластерное приближение обеспечивает фазовую диаграмму, ширина которой в пределах  $0,01 - 0,02$  по концентрации совпадает с данными метода Монте Карло и в масштабе рисунка не отличается от последних.

Критическая температура, химический потенциал и вероятности заполнения двух соседних узлов решетки частицами или вакансиями, найденные на основе предложенного подхода, в пределах одного процента совпадают с точными значениями, известными из решения Онзагера моде-

ли Изинга в нулевом магнитном поле (соответствует модели решеточного газа при концентрации  $c = 0,5$ ) [14] и с результатами моделирования по методу Монте Карло [12]. Другими словами, результаты данной работы могут быть использованы для расчета термодинамических свойств решеточных систем во всей области термодинамических переменных (за исключением, возможно, ближайшей окрестности критической точки) с точностью порядка точности моделирования по методу Монте Карло.

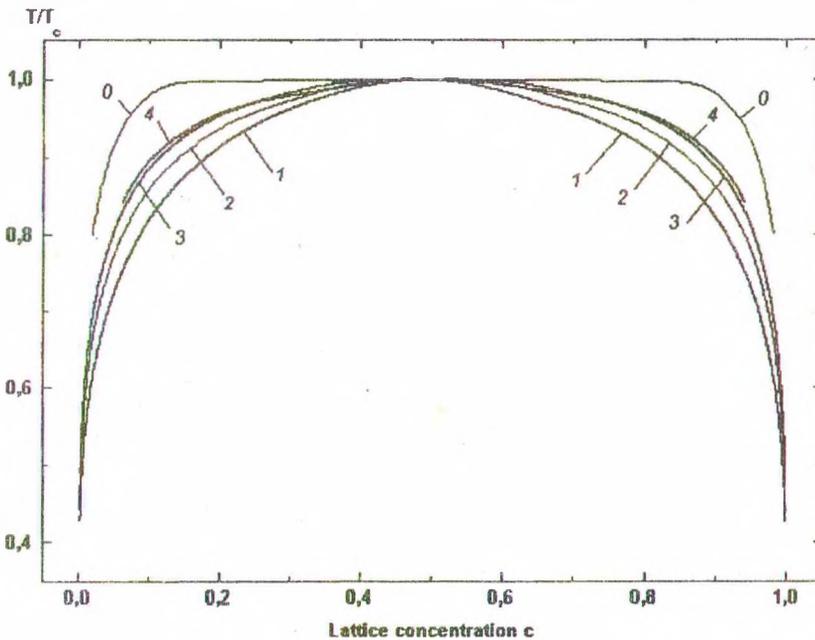


Рис. 1

Фазовые диаграммы решеточного газа с отталкиванием ближайших соседей в различных приближениях. Цифры, обозначающие кривые, соответствуют размеру кластера  $k \times k$  ( $k = 1, 2, 3, 4$ ) кластерного приближения. 0 обозначает результаты самосогласованного диаграммного приближения и моделирования по методу Монте Карло.

$T_c$  - критическая температура.

Отметим, что решение уравнений (18), (33) для нахождения средних потенциалов и вычисление свободной энергии согласно (38) требуют использования учетверенной точности («extended»). Тем не менее, ввиду простоты указанной системы уравнений, получение данных вдоль одной изотермы с шагом 0,01 по концентрации на PC Pentium-100 занимает несколько секунд, тогда как моделирование по методу Монте Карло выполняется на мощных вычислительных комплексах с использованием параллельных алгоритмов [12, 15].

Работа выполнена при поддержке INTAS, грант 96 - 0533.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Fisher M.E. The nature of critical points. - Colorado: Univ. of Colorado Press, 1965.
2. Haus J. and Kher K.W. // Phys. Reps. - 1987. - V. 150. - P. 263.
3. Gomer R. // Rep. Progr. Phys. - 1990. - V. 53. - P. 917.
4. Zhdanov V.P. Elementary Physicochemical Processes on Solid Surfaces. - New York: Plenum, 1991.
5. Allnatt A.R. and Lidiard A.B. Atomic transport in solids.- Cambridge: Cambr. Univ. Press, 1993.
6. Vikhrenko V.S. and Bokun G.S. // Adv. in Synerg. - 1997. - V. 9. - P.180.
7. Vikhrenko V.S. and Bokun G.S. // Ionics. - 1997. - V. 1&2. - P. 44.
8. Zhdanov V.P. // Surf. Sci. - 1985. - V. 140. - P. L 13.
9. Balescu R. Equilibrium and nonequilibrium statistical mechanics. - New York: John Wiley and Sons, 1978.
10. Hill T.L. Statistical mechanics. - New York: Mc Graw, 1956.
11. Binder K. and Landau D.P. // Phys. Rev. - 1980. - V. B21. - P. 1941.
12. Uebing C. and Gomer G. // J. Chem. Phys. - 1991. - V. 95. - P. 7636.
13. Бокун Г.С., Вихренко В.С. // Труды БГТУ. - 1997. - Вып. V. Сер. IV: Физико - математические науки и информатика. - С. 20.
14. Huang K. Statistical mechanics. - New York: John Wiley and Sons, 1963.
15. C. Uebing and G. Gomer, Surf. Sci. 381 (1997) 33.

УДК 536.758

В.В. Белов, доцент;  
 А.В. Кондратенко, ассистент;  
 В.Б. Немцов, профессор

### СВОЙСТВА ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ В ПРИГРАНИЧНЫХ ОБЛАСТЯХ

The integral equation for one-particle distribution function taking into account an external field gives the basis to calculate the dependence of coefficients of orientational and surface elasticity and viscous coefficients of liquid crystals on the distance from nonhomogeneity source.

В работе [1] было получено интегральное уравнение для одночастичного потенциала средних сил  $\varphi$  системы несферических частиц, моделирующих жидкокристаллическую среду, в присутствии некоторого внешнего поля  $u$  в следующем виде:

$$\beta\varphi(1) = -\frac{\rho}{\Omega} \int d^2C_2(1,2) \exp\{-\beta[\varphi(2) + u(2) - 1]\}. \quad (1)$$