

МИНИСТЕРСТВО ВЫСШЕГО И СРЕДНЕГО СПЕЦИАЛЬНОГО
ОБРАЗОВАНИЯ БЕЛОРУССКОЙ ССР

БЕЛОРУССКИЙ ОРДЕНА ТРУДСОЮГО КРАСНОГО ЗНАМЕНИ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ В.И. ЛЕНИНА

На правах рукописи

ЮЖАК Михаил Иосифович

ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МОЛЕКУЛЯРНЫХ КОНДЕНСИРОВАННЫХ
СИСТЕМ НА ОСНОВЕ КИНЕТИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ УСЛОВНЫХ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ

01.04.02 - теоретическая и математическая
физика

А в т о р е ф е р а т
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Минск - 1982

Работа выполнена на кафедре теоретической механики Белорусского ордена Трудового Красного Знамени технологического института имени С.М.Кирова.

- Научные руководители - профессор, доктор физико-математических наук РОТТ Л.А., доцент, кандидат физико-математических наук ВИХРЕНКО В.С.
- Официальные оппоненты - профессор, доктор физико-математических наук КЛИМОНТОВИЧ Ю.Л. (Московский университет им.М.В.Ломоносова), кандидат физико-математических наук КРУГЛОВ В.И. (Институт физики АН БССР)
- Ведущая организация - Институт высоких температур АН СССР.

Защита состоится 4 июня 1982 года в 10 часов на заседании специализированного Совета К 056.03.09 по присуждению ученой степени кандидата наук в Белорусском ордена Трудового Красного Знамени государственном университете имени В.И.Ленина (220080, г. Минск, Университетский городок, главный корпус, к. 206).

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Белорусского государственного университета имени В.И.Ленина.

Автореферат разослан "27" апреля 1982 г.

Ученый секретарь Совета
доцент

Л.И. Комаров

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Постановка задачи и актуальность темы. Термин "Динамические свойства молекулярных систем" в последние годы все чаще используется в литературе. За этим стоят насущные запросы экспериментальных исследований, основанных на применении принципиально новых или ранее известных, но существенно усовершенствованных физико-химических методов изучения вещества, когда становится возможным познавать такие его свойства, интерпретация которых требует знания динамического или, говоря другими словами, мгновенного состояния молекулярной системы. Все, что происходит на малых временах межмолекулярного взаимодействия, находит почти непосредственное проявление и не "теряется" в привычном статистическом усреднении.

Под динамическими свойствами, как правило, понимают теперь поведение временных корреляционных функций (ВКФ) динамических переменных (координат, импульсов, сил, потоков) отдельных молекул или их групп. Наиболее полно исследовано поведение ВКФ на малых временах, а также асимптотика их на больших временах. Для изучения поведения ВКФ на промежуточных временных интервалах тратится много усилий, однако результатов получено еще мало. В особенности это относится к кристаллическому состоянию вещества, в том числе вблизи линий фазовых переходов.

Причина затруднений заключается не только в сложности построения общей теории, но и в больших вычислительных трудностях, преодолеть которые не удается даже с помощью численных методов, в частности разностных, эффективно используемых при решении макроскопических задач (газо-, гидродинамики). Такое положение объясняется самой сутью конденсированных систем, для которых характерны сильное межчастичное взаимодействие, многочастичность, большая размерность фазового пространства. Преодолеть вычислительные трудности можно лишь, построив специальные разностные схемы для решения микроскопических задач.

Цель диссертационной работы состояла в построении общей теории ВКФ, которая позволила бы изучать динамические свойства классически молекулярных конденсированных систем в широком интервале изменения термодинамических переменных с помощью определения временной эволюции корреляторов динамических переменных, и разработке методов решения полученных микроскопических уравнений, доведя

их до конкретных физических приложений. Эффективность теории предполагалось проверить путем исследования корреляционных и спектральных характеристик совершенных и несовершенных молекулярных кристаллов.

Научная новизна работы. Введены приведенные частичные динамические функции и на их основе построена общая теория ВКФ динамических переменных. Впервые в теории твердого тела систематически используются разложения по специальным ортогональным полиномам с равновесными функциями распределения в качестве весовых.

Предложена эффективная разностная схема интегрирования системы микроскопических уравнений в частных производных.

Вычислены ВКФ различных частиц кристалла. На основании сопоставления поведения автокорреляционных функций скоростей и ВКФ скоростей различных частиц сделан вывод о существовании характерной величины времени коллективизации движения частиц в кристалле и дана ее оценка. Показано влияние анизотропии распространения возмущения на устойчивость кристаллической решетки. Получены ВКФ скоростей легкой и тяжелой примесей замещения в молекулярном кристалле, а также частиц кристалла вблизи вакансии и примеси.

Практическая ценность. Общая теория и результаты вычисления корреляционных и спектральных характеристик совершенных и несовершенных кристаллов могут быть использованы для конкретных физико-химических расчетов. Построенная разностная схема может быть использована для численного интегрирования уравнений в частных производных.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Общая теория ВКФ на основании предложенных динамических функций.
2. Метод замыкания цепочек уравнений для кинетических функций условных распределений и приведенных динамических функций, основанный на выделении корреляционных добавок к используемым равновесным корреляциям.
3. Разностная схема решения сформулированной системы микроскопических интегродифференциальных уравнений в частных производных.
4. Методика использования ортогональных полиномов для исследования ВКФ конденсированных молекулярных систем.
5. Результаты конкретных вычислений ВКФ скоростей и их спек-

тральных плотностей частиц совершенного и несовершенного кристаллов, позволившие исследовать зависимость характера ВКФ скоростей от термодинамических параметров, их особенности при наличии резонансных и локальных колебаний, выявить роль анизотропии распространения локального возмущения в обеспечении устойчивости кристаллической решетки.

Апробация работы. Результаты работы докладывались на VI Всесоюзной конференции по теплообмену (Минск, 1980), УП Всесоюзной конференции по механизмам релаксационных явлений в твердых телах (Воронеж, 1980), IV и V Республиканских конференциях молодых ученых по физике (Гомель, 1977; Гродно, 1978), на научных семинарах в Вычислительном центре АН СССР, МГУ имени М.В. Ломоносова и БГУ имени В.И. Ленина.

Публикации. Основные результаты работы опубликованы в одиннадцати статьях и четырех тезисах докладов.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, пяти глав и заключения, содержит 164 страницы машинописного текста, 32 рисунка, 3 таблицы, библиография - 142 наименования.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Исследование динамических свойств молекулярных систем в работе основано на изучении эволюции ВКФ вида

$$C(t) = \langle A(0)B(t) \rangle = \int_{\Omega_r} A(0)B(t) \mathcal{D}_N(t, \dots, N) d\Gamma \quad (1)$$

Здесь A и B - функции динамических переменных системы N частиц (их координат \vec{q}^A и импульсов \vec{p}^A), тензорная размерность которых может быть произвольной, $\mathcal{D}_N(t, \dots, N)$ - равновесная функция распределения. Интегрирование ведется по фазовому пространству Ω_r всей системы.

Зависимость от времени функция $B(t)$ динамических переменных определяется оператором Лиувилля

$$B(t) = \exp(-iL_N t) B(0) \quad (2)$$

Учитывая, что равновесная функция распределения является интегралом движения и коммутирует с оператором $\exp(-iL_N t)$, перепишем (1) в виде

$$C(t) = \int_{\Omega_r} A(0) e^{-tL_N} / B(0) \mathcal{D}_N(1, \dots, N) d\Gamma = \int_{\Omega_r} A(0) B_N(t) d\Gamma. \quad (3)$$

Введенная функция B_N подчиняется, как следует из (3), уравнению Лиувилля и удовлетворяет начальному условию

$$B_N(0) = B \mathcal{D}_N(1, \dots, N). \quad (4)$$

Не являясь в полном смысле н.л. функцией распределения, ни ее возмущением, B_N тем не менее подчиняется уравнению Лиувилля, что дает возможность провести определенную аналогию в поведении B_N и возмущения равновесной функции распределения.

В частности, — и это особенно важно — может быть применен метод сокращения описания, широко используемый для исследования поведения функций распределения. Дальнейшее рассмотрение выполнено в F_N — приближении метода условных распределений, соответствующем одночастичному заполнению молекулярных ячеек — основному состоянию в распределении частиц при высоких плотностях, присущих конденсированному состоянию вещества. Сокращение описания достигается переходом к приведенным S — частичным динамическим функциям $B(S; t)$, определяемым интегрированием функции B_N по координатам и импульсам $N-S$ частиц.

На основании уравнения Лиувилля для функций $B(S; t)$ сформулирована бесконечная цепочка интегродифференциальных уравнений, подобная цепочке уравнений для кинетических функций условных распределений. Цепочка уравнений для функций $B(S; t)$ представлена в безразмерном виде. В качестве параметров безразмерности выбраны энергетический ϵ и линейный σ параметры двухпараметрического потенциала парного взаимодействия. Время выражено в единицах

$$\tau = \sigma \sqrt{m/\epsilon}, \quad (5)$$

где m — масса частицы. По порядку величины это характерное время равно 10^{-12} с (в частности, для аргона $\tau = 2,16 \cdot 10^{-12}$ с, для криптона — $2,88 \cdot 10^{-12}$ с).

Из возможности представления цепочки уравнений для динамических функций в безразмерной форме следует закон соответственных состояний для ВКФ и связанных с ними макроскопических характеристик среды (коэффициенты вязкости, диффузия и т.п.).

Решать систему зацепляющихся уравнений для приведенных динамических функций можно только после ее замыкания. Замыкание основано на использовании группового разложения вида

$$b_1(\{1\}; t) = \beta_1(k; t),$$

$$b_2(\{2\}; t) = F_N^{(0)}(k/1) \beta_1(t; t) + F_N^{(0)}(1/k) \beta_1(k; t) + \beta_2(t, k; t). \quad (6)$$

К характерным особенностям разложения (6) относится то, что первые два слагаемых содержат дваждысловные равновесные функции распределения одинаковой с приведенной динамической функцией b_2 "частичности". Это позволяет учесть равновесные корреляции соответствующих порядков и тем самым реализовать позитивные качества равновесных функций условных распределений. Замыкание осуществляется путем аппроксимации старших корреляционных добавок β_2 или β_3 и т.д., что дает возможность провести эту операцию на возможно более "позднем" этапе. К достоинствам разложения (6) относятся простота и естественность распространения на следующие 3-, 4-, ..., n -частичные функции, что продемонстрировано в диссертации. Подобная методика использована и при замыкании цепочки уравнений для кинетических функций условных распределений. Получена также цепочка уравнений для корреляционных добавок β_s .

Теория проиллюстрирована на примере вычисления ВКФ скоростей. Для этого функции динамических переменных A и B приняты в виде

$$\hat{A}(0) = \frac{\hat{p}^r(0)}{\sqrt{\theta}} = \frac{\hat{p}^r}{\sqrt{\theta}}, \quad \hat{B}(t) = \frac{\hat{p}^r(t)}{\sqrt{\theta}}, \quad \hat{B}_N(0) = \frac{\hat{p}^r}{\sqrt{\theta}} \mathcal{D}_N. \quad (7)$$

На основании (4) и (6) получены начальные условия для корреляционных добавок:

$$\hat{\beta}_1(1; 0) = \frac{\hat{p}^r}{\sqrt{\theta}} F_N(1), \quad \hat{\beta}_1(k; 0) = 0 \text{ при } k \neq 1; \quad (8)$$

$$\beta_2(t, k; 0) = 0; \dots$$

$F_N(1)$ — одночастичная равновесная функция условных распределений. Начальное состояние системы можно интерпретировать как возмущение одночастичной функции $\hat{\beta}_1$ лишь в одной из ячеек системы при невозмущенных значениях многочастичных функций $\hat{\beta}_s = 0$ ($s \geq 2$). В результате эволюции, происходящей в соответствии с уравнением Лиувилля всей системы, возмущение последовательно распространяет-

ся как на другие ячейки системы, так и на многочастичные функции.

Замкнутое уравнение для одночастичной функции β_1 получено с помощью аппроксимации бинарной добавки β_2 . С этой целью последняя представлена в виде ряда по тензорным полиномам Эрмита H

$$\beta_2(k, j; t) = [\psi^{(0,0)}(\vec{q}^k, \vec{q}^j; t) + \psi^{(1,0)}(\vec{q}^k, \vec{q}^j; t) \cdot H_{(1)}(\vec{p}^k) + \psi^{(0,1)}(\vec{q}^k, \vec{q}^j; t) \cdot H_{(1)}(\vec{p}^j) + \dots] A^{-2} \exp[-(\rho_k^2 + \rho_j^2) \rho \theta]. \quad (9)$$

Целесообразность использования полиномов Эрмита следует из того, что максвелловское распределение является их весовой функцией, а усреднение в (I) выполняется по равновесному распределению. В первом приближении теории можно ограничиться в (9) первым членом. Замкнутая система уравнений для одночастичных функций имеет вид

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{p}^k \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{q}^k} + \vec{F}_k(\vec{q}^k) \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{p}^k} \right) \beta_1(k; t) = B(\beta_1). \quad (10)$$

Здесь $\vec{F}_k = \sum_{j=1}^N \vec{F}_{kj}(\vec{q}^j)$ - равновесная средняя сила, действующая на частицу k со стороны ее равновесного окружения. Правая часть, являясь функционалом одночастичных функций окружающих частиц, описывает влияние неравновесности окружения k - частицы на ее поведение.

В диссертации показано, что использование системы уравнений (10) обеспечивает правильные значения вторых производных по времени ВКФ скоростей в начальный момент времени и сохранение нормировки динамических функций.

Теория обобщена на вторые F_{12} - приближение метода условных распределений, соответствующее учету таких состояний, когда молекулярная ячейка может быть пустой или заполненной одной или двумя частицами, что особенно важно для исследования динамических свойств в области жидкого состояния вещества. Осуществлено также обобщение теории на многокомпонентные системы, состоящие из молекул произвольного количества сортов. В обоих случаях получены замкнутые уравнения для одночастичной корреляционной добавки к приведенным динамическим функциям.

С вычислительной точки зрения особенность системы уравнений

(10) состоит в трудности учета резко изменяющихся с расстоянием сил межчастичного взаимодействия. Попытки использовать известные схемы первого и квазивторого порядков точности (Лакса, Лакса-Вендрофа) и положительным результатам не привели вследствие большой численной диффузии, рассогласованности решений на различных сетках, неустойчивостей и т.п.. В то же время оказалось возможным развить новую разностную схему для интегрирования микроскопических уравнений конденсированной среды, которая допускала реализацию на ЭВМ средней мощности типа ЕС-1022.

Схема строилась на основе формального решения системы (10) интегрированием вдоль фазовых траекторий оператора динамического сдвига, стоящего в ее правой части. Сдвиги вдоль фазовых траекторий определялись в результате интегрирования системы характеристических уравнений оператора с точностью до квадратичных по малому временному интервалу членов. Далее решение раскладывалось в ряд по сдвигам с учетом членов второго порядка и частные производные заменялись разностными. Схема содержит все члены второго порядка по шагу временной сетки и частично, благодаря квадратичным по сдвигам слагаемым, члены третьего и четвертого порядков.

Результаты вычисления ВКФ скоростей модельной одномерной системы частиц свидетельствуют о том, что предположения, положенные в основу вывода уравнений (10), не вносят грубых искажений в описание поведения системы, а построенная разностная схема обеспечивает устойчивое решение уравнений (10).

Интегрирование системы (10) в реальном физическом пространстве сопряжено с необходимостью преодоления "барьера многомерности", поскольку фазовое пространство даже одной частицы шестимерное. С этой целью произведена редукция от (10) к системе обыкновенных дифференциальных уравнений. Физические соображения подсказывают, что поскольку рассматриваются состояния вблизи равновесия, то равновесное состояние можно принять за базисное, а отклонение описывать, используя равновесную функцию распределения как производящую. Одночастичная корреляционная добавка β_1 раскладывалась в импульсном пространстве в ряд по тензорным полиномам Эрмита и в координатном - по специальным ортогональным полиномам с координатной частью функций распределения в качестве весовой функции. В первом приближении теории ограничивались линейными полиномами. В результате была получена система обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка для коэффициентов разложения

$$\ddot{\hat{\varphi}}_{(0)}^{(m)}(k; t) + \omega^2 \hat{\varphi}_{(0)}^{(m)}(k; t) = \sum_{j \neq k}^N \hat{C}_{jk} \cdot \hat{\varphi}_{(0)}^{(m)}(j; t), \quad (II)$$

где

$$\omega^2 = \frac{1}{3} \sum_{j \neq k}^N \hat{C}_{jk} \cdot \hat{E}, \quad \hat{C}_{jk} = \left\langle \frac{\partial^2 \Phi_{jk}(z_{jk})}{\partial q_j^2 \partial q_k^2} \right\rangle. \quad (I2)$$

Начальные условия для системы (II) следуют из (8)

$$\hat{\varphi}_{(0)}^{(m)}(1; 0) = \hat{E}, \quad \hat{\varphi}_{(0)}^{(m)}(k; 0) = 0 \text{ при } k \neq 1, \quad \dot{\hat{\varphi}}_{(0)}^{(m)}(k; 0) = 0. \quad (I3)$$

Тензор \hat{C}_{jk} является аналогом динамической матрицы гармонической системы, однако в отличие от нее вычисляется в результате статистического усреднения второй производной потенциала межчастичного взаимодействия и эффективным образом учитывает ангармонизмы всех порядков. Он существенно зависит, в отличие от гармонической и квазигармонической теорий, как от объема, так и от температуры системы.

Теория использована для исследования корреляционных и спектральных характеристик совершенного и несовершенного молекулярно-гранецентрированного кубического кристалла.

При исследовании совершенного кристалла рассматривалось движение частиц, расположенных в $1/48$ подного пространства, так как узлы, лежащие на одной и той же координационной сфере и переходящие друг в друга при преобразованиях точечной группы симметрии кристалла (\bar{O}_h), являются эквивалентными. Использование свойств симметрии решетки позволяет сократить количество интегрируемых уравнений почти на два порядка. Система обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка для скалярных инвариантов тензора $\hat{\varphi}_{(0)}^{(m)}$ интегрировалась численным методом с помощью разностной схемы Верле.

На рис. 1 показано поведение автокорреляционной функции скоростей (в единицах $\langle \rho^2 \rangle$) в зависимости от времени при температуре*

$\theta = 1$ и объеме $\nu = 0,98$. Сплошная линия соответствует максимальному количеству учитываемых координационных сфер $Z_m = 200$ и находится в соответствии с данными, полученными методом молекулярной динамики. Точками показано решение для $Z_m = 50$. Различия в

*Температура выражена в единицах ϵ/k_B , а объем - в единицах σ^3 , где ϵ и σ - параметры потенциала Леннард-Джонса.

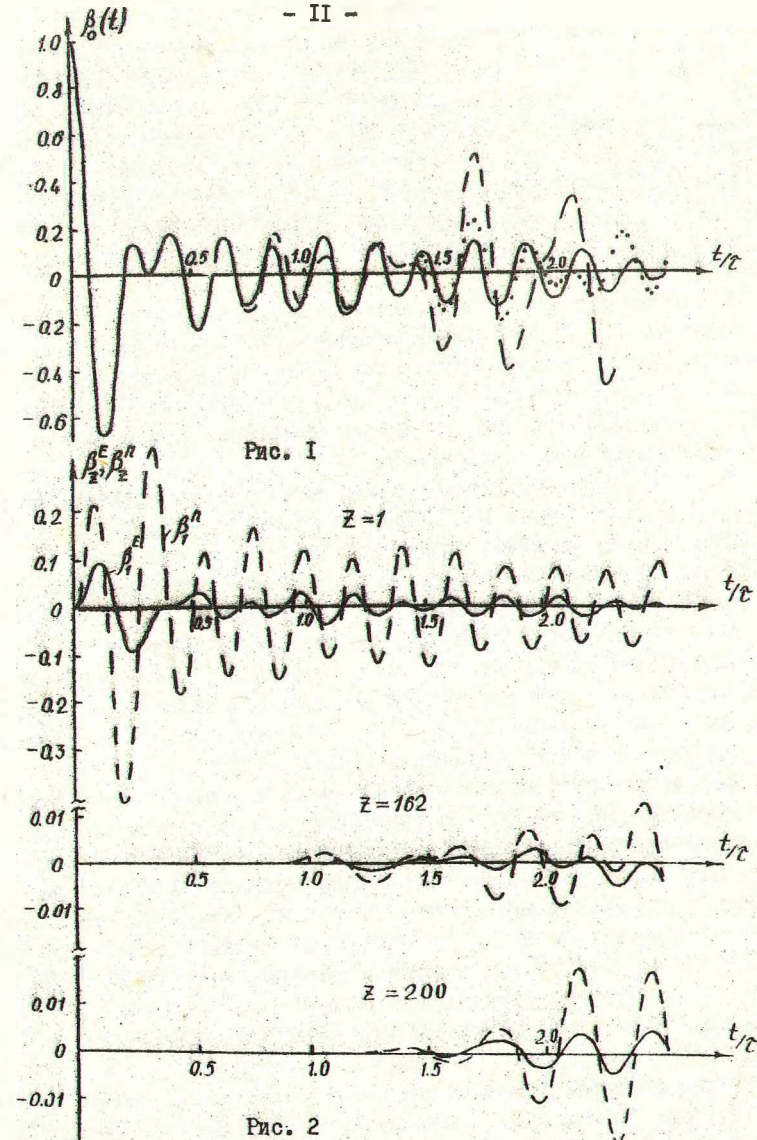


Рис. 2

решениях, которое становится заметным начиная с $t = 1,5\tau$, связано с влиянием граничных условий.

Рис. 2 иллюстрирует распространение возмущения по системе. На нем приведены сферически симметричные (сплошные линии) и бесшпуровые (штриховые линии) части ВКФ скоростей частицы на координационных сферах $\bar{X} = 1,162, 200$ и центральной частицы. Как видно из рисунка, возбуждение доходит до границы системы за время $t \approx 1,7\tau$. Для рассмотрения поведения ВКФ на более поздних временных интервалах нужно последовательно увеличивать количество учитываемых сфер.

Штриховая линия на рис. 1 получена в предположении о сферически симметричном распространении возмущения от центральной ячейки. Потеря устойчивости происходит на временах, когда возмущение охватывает достаточно большое количество сфер. Результаты вычисления свидетельствуют о том, что анизотропия кристалла играет важную роль в обеспечении его устойчивости.

Сопоставление рисунков 1 и 2 показывает, что во времени достижения в автокорреляции минимума и последующего уменьшения ее абсолютного значения анизотропия составляющая корреляции с частицей на первой сфере возбуждается в максимальной степени. Дальнейший рост автокорреляции оказывается замедленным, центральная частица как бы испытывает отдачу за счет резкого возрастания корреляции с частицей на первой координационной сфере. Далее возбуждение центральной частицы гасится, и она движется вместе с окружением. Таким образом, время $\sim 0,5\tau$ можно рассматривать как время "коллективизации" движения частиц в системе.

Была исследована зависимость ВКФ скоростей от термодинамических переменных при смещении по термодинамической плоскости от линии плавления вглубь области кристаллического состояния по изотерме, а затем по изохоре. Были также вычислены частотные спектры ВКФ скоростей. При увеличении объема спектр сдвигается в область более низких частот, причем продольные колебания чувствительнее к изменению объема, чем поперечные. В итоге расстояние между характерными пиками спектра по частоте при увеличении объема от $\nu = 0,92$ до $\nu = 0,98$ (при $\theta = 1$) сократилось на 15%. Как известно, в жидкости оба пика сливаются в один.

Теория применялась для описания динамического поведения примесного атома. В этом случае фактически приходилось рассматривать двухкомпонентную систему - масса и характеристики взаимодействия

примесного атома отличаются от таковых для атомов матрицы. Переход к безразмерным переменным в исходных уравнениях для одночастичных корреляционных добавок осуществлялся с помощью параметров частиц матрицы. В том случае, когда в начальный момент возмущается примесный атом, симметрия задачи сохраняется такой же, как и при исследовании динамических свойства совершенного кристалла. Были рассмотрены в качестве примесей замещения изотопические примеси в аргоне, а также атом. криптона в матрице аргона и наоборот.

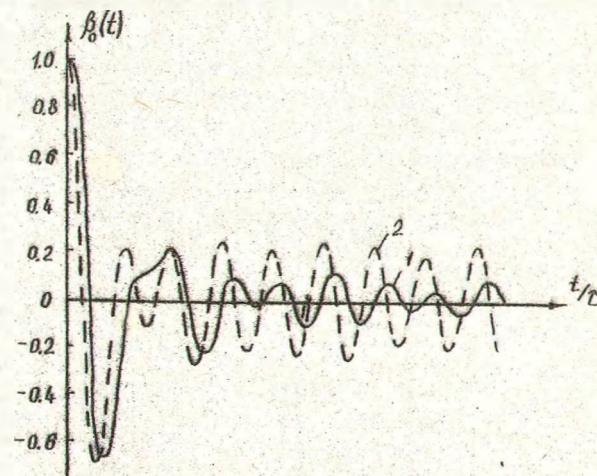
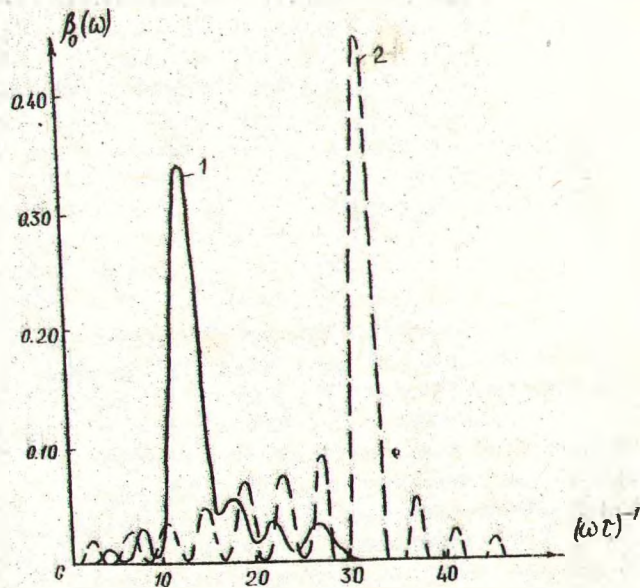
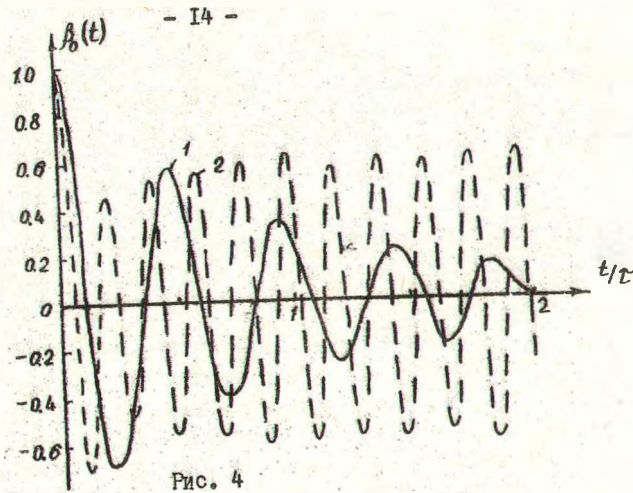


Рис. 3

Автокорреляционная функция скоростей более тяжелой частицы ^{40}Ar в ^{36}Ar (рис. 3, кривая 1) не имеет двух характерных положительных пиков как в случае совершенного кристалла (рис. 1 при $t = (0,3 + 0,5)\tau$). Легкое окружение не в состоянии обеспечить "провал" в положительной корреляции, и β_0 возрастает, достигая максимума, примерно соответствующего второму пику на рис. 1. Наоборот, в автокорреляционной функции более легкой частицы ^{36}Ar в матрице ^{40}Ar "провал" более сильно выражен. На временах $t > 0,5\tau$ амплитуда колебаний тяжелой примеси существенно ниже, чем в совершенном кристалле, а более легкой - значительно выше. Причем все эти существенные качественные особенности проявляются при незначительном различии масс ($\sim 10\%$)

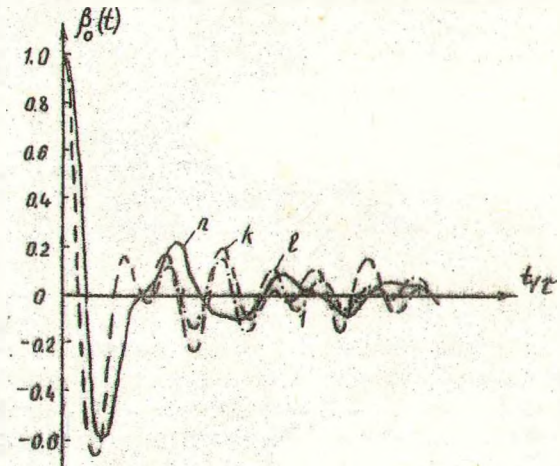


между частицами примеси и матрицы. Частотные спектры автокорреляционных функций скоростей тяжелой и легкой изотопических примесей иллюстрируют перераспределение частот соответственно в низко- и высокочастотные части спектра по сравнению со спектром совершенного кристалла.

При большом различии масс (^{86}Kr в ^{40}Ar), хотя первоначально амплитуда колебаний автокорреляционной функции скоростей тяжелой примеси достаточно велика (рис. 4, кривая 1), ее затухание имеет экспоненциальный характер с характерным временем $\sim 0,9\tau$. Более легкая частица (^{40}Ar в ^{86}Kr - кривая 2) обнаруживает колебания большой амплитуды на протяжении длительного времени. Спектры (рис. 5) показывают, что наличие тяжелой примеси (^{86}Kr в ^{40}Ar - кривая 1) приводит к возникновению резонансных колебаний, а легкой (^{40}Ar в ^{86}Kr - кривая 2) - локальных колебаний.

Исследовалось поведение частиц вблизи примеси и вакансии. Симметрия задачи в этом случае существенно понижается.

На рис. 6 представлено поведение трех компонентов (λ - в



направлении на вакансию и λ, ℓ - в перпендикулярных направлениях, остальные - равны нулю ввиду свойств симметрии) автокорреляционной функции скорости частицы вблизи вакансии. Если в направлениях λ и ℓ поведение функции мало отличается от наблюдавшегося в совершен-

ном кристалле, то в направлении на вакансию характер функции существенно меняется. Поведение на малых временах во многом напоминает случай тяжелой примеси замещения, а на временах $t > 0,5 \tau$ приобретает характер нерегулярных затухающих колебаний. На спектрах наблюдается перераспределение частот в низкочастотную область. Обращает на себя внимание значительный пик резонансного типа в ω - составляющей. Усредненный по трем составляющим спектр во многом напоминает жидкостной, но в данном случае он сдвинут в высокочастотную область и близок к нулю при малых частотах.

Была получена АКФ частиц матрицы ^{60}Kz вблизи легкой примеси ^{40}Az . По виду ее спектральной плотности (рис. 7) можно заключить, что наличие легкой примеси приводит к появлению локальных

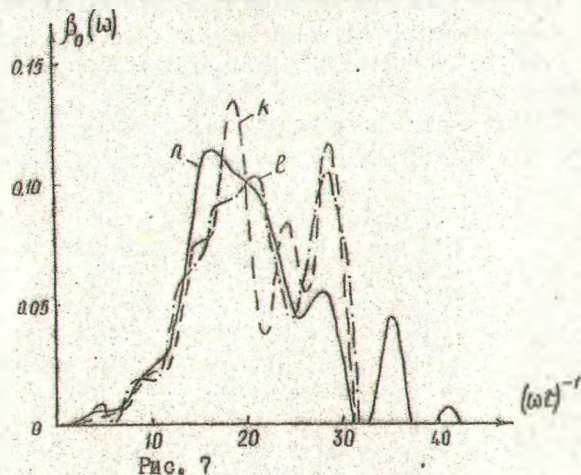


Рис. 7

колебаний и у близлежащих частиц матрицы, которые проявляются через ω - составляющую функции. При удалении частицы матрицы от легкой примеси локальные колебания быстро ослабевают. Наличие тяжелой примеси приводит к некоторому перераспределению спектральной плотности колебаний близлежащих частиц матрицы в область низких частот.

Исследована роль корреляций более высокого порядка в описании динамического поведения совершенного кристалла. В этом случае замыкание осуществлялось на третьем уравнении цепочки уравнений для корреляционных добавок (в F_{11} - приближении метода условных распределений). Получена система двух дифференциальных уравнений второ-

го порядка для коэффициентов разложения корреляционных добавок по ортогональным полиномам. Анализ структуры этой системы позволил ввести параметр η , который может рассматриваться как качественный критерий влияния второго приближения теории.

$$\eta = \left[\frac{\langle G_{ij}^{xx} q_i^x \rangle}{6 \langle G_{ij}^{xx} \rangle} \right]^2, \quad (14)$$

где $G_{ij}^{xx} = \frac{\partial^2 \Phi_{ij}}{\partial q_i^x \partial q_j^x}$, q_i^x - проекция координаты i частицы на направление от i частицы к j . Вычисления показали, что при переходе от состояний с $\theta = 1,0$ к $\theta = 0,3$ и $\vartheta = 0,92$ значение этого критерия уменьшается более чем в два раза и при дальнейшем понижении температуры эта тенденция сохраняется.

На рис. 8 приведены результаты вычислений при $\theta = 1$, $\vartheta = 0,98$

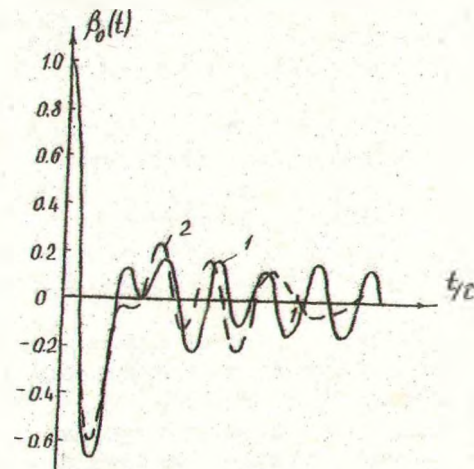


Рис. 8

автокорреляционной функции импульсов в первом (кривая 1) и втором (кривая 2) приближениях теории. К наиболее существенным отличиям относится уменьшение глубины первого минимума, исчезновение первого положительного пика и более быстрое затухание колебаний при $t > 0,5 \tau$, что соответствует результатам вычислений по методу молекулярной динамики. При переходе к состоянию с $\theta = 0,3$ и $\vartheta = 0,92$ результаты вычислений в первом и втором приближениях

отановятся близкими.

Основное содержание диссертации опубликовано в следующих работах:

1. Вихренко В.С., Кулак М.И. Релаксационные характеристики неферрической броуновской частицы. Взаимосвязь ориентационных и трансляционных степеней свободы. - Изв. АН БССР: сер. физ.-мат. наук, 1973, № 4, с. 67-72.
2. Вихренко В.С., Кулак М.И. О преобразовании тензоров в пространстве трансляций и поворотов твердого тела. - В кн.: Теор. и прикл. механика, Минск: Высшая школа, 1975, вып. 2, с. 141-146.
3. Вихренко В.С., Кулак М.И., Ротт Л.А. Замкнутая система кинетических уравнений в методе коррелятивных функций условных распределений. - Изв. АН БССР: сер. физ.-мат. наук, 1977, № 3, с. 97-101.
4. Кулак М.И., Вихренко В.С. Интегрирование кинетических уравнений в методе коррелятивных функций условных распределений. - Тезисы докл. IV расп. конф. молодых ученых по физике. Минск: АН БССР 1977, с. 24.
5. Вихренко В.С., Кулак М.И. Разностная схема второго порядка точности в задаче определения динамического поведения условных частичных функций распределения. - В кн.: Теор. и прикл. механика. - Минск: Высшая школа, 1978, вып. 5, с. 69-78.
6. Вихренко В.С., Кулак М.И. Кинетическое уравнение в статистической теории кристалла. - Изв. АН БССР: сер. физ.-мат. наук, 1978 № 6, с. 70-76.
7. Кулак М.И. Вычисление временных корреляционных функций на основе метода условных распределений. - Тезисы докл. У расп. конф. молодых ученых по физике. Минск: АН БССР, 1978, с. 33.
8. Вихренко В.С., Кулак М.И. Метод приведенных динамических функций в теории временных корреляционных функций. - Докл. АН БССР, 1980, т. 24, № 2, с. 129-132.
9. Кулак М.И., Вихренко В.С. Исследование временных корреляционных функций с помощью кинетического уравнения. - Изв. АН БССР: сер. физ.-мат. наук, 1980, № 6, с. 90-95.
10. Кулак М.И., Вихренко В.С. Распространение локальных тепловых возмущений в твердом теле. - Материалы VI Всесоюзной конф. по тепломассообмену. Минск, 1980, т. IX, с. 172-175.

II Vikhrenko V.S., Bokun G.S., Kulak M.I. Truncation Procedure for High Order Reduced Distribution Functions. II. The Compatibility Problem. - Physica, 1980, v.100A, no.2, pp.397 - 416.

12. Вихренко В.С., Кулак М.И. Разностная схема системы микро-скопических уравнений конденсированной системы. - Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 1981, т. 21, № 5, с. 1249-1256.

13. Ротт Л.А., Вихренко В.С., Кулак М.И. Кинетические уравнения конденсированной среды и методы их интегрирования. - Инж.-физич. журнал, 1981, т. 41, № 2(8), с. 370.

14. Кулак М.И., Вихренко В.С. К исследованию динамического поведения системы многих частиц. - В кн.: Теор. и прикл. механика. Минск: Высшая школа, 1982, вып. 9, с. 106-112.

15. Кулак М.И., Вихренко В.С. Временные корреляционные функции частиц молекулярного кристалла. - Изв. АН БССР: сер. физ.-мат. наук, 1982, № 4