

СТАТИСТИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОГО ГАМИЛЬТониАНА ДЛЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ГАУССА

Выбор эффективного гамильтониана, являющегося функционалом от поля плотности параметра порядка [1], составляет первооснову феноменологической флуктуационной теории [2]. Если эффективный гамильтониан рассматривать (как первое гармоническое приближение) в виде квадратичной формы в распределении Гаусса, то теория сразу же сталкивается с неизвестной матрицей коэффициентов, определяющей указанную квадратичную форму. Имеющая место неопределенность, как будет показано, может быть разрешена статистически в рамках гиббсовского формализма. Эта цель достижима не только для гармонического приближения, но и с учетом последующих членов разложения — ангармонизмов различного порядка.

В [3] было показано, что в развиваемой теории эффективный гамильтониан флуктуаций плотности может быть представлен как гамильтониан парных взаимодействий квазичастиц, находящихся во внешнем поле. При этом квазичастицы представляют собой флуктуации плотности в молекулярных ячейках, на которые мысленно разбит весь объем системы. Для указанных квазичастиц определены как соответствующие корреляционные функции (унарная, бинарная и т. д.), так и определяющие их интегро-дифференциальные уравнения. Теория получается в виде далеко идущей аналогии с теорией коррелятивных функций условных распределений [4].

Эффективный гамильтониан флуктуаций плотности $\Omega\{n_k\}$ может быть представлен в виде разложения по одночастичным $\Psi(x_i)$, двухчастичным $\Psi(x_i, x_j)$ и т. д. эффективным потенциалам

$$\Omega\{n_k\} = \Omega(\bar{n}) + \sum_{i=1}^N \Psi(x_i) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N \Psi(x_i, x_j) + \dots, \quad (1)$$

где n_k определяет плотность ρ_k в ячейке объема ω с номером k ($\rho_k = n_k/\omega$); \bar{n} — среднее значение; $x_i = n_i - \bar{n}$, а фигурные скобки обозначают совокупность значений плотности по всем ячейкам системы.

Если далее через $W_1(x_i)$ и $W_2(x_i, x_j)$ обозначить соответственно унарную и бинарную функции распределения флуктуаций плотности (условные пространственные корреляционные функции), то первое уравнение бесконечной цепочки зацепляющихся интегро-дифференциальных уравнений имеет вид

$$\frac{\partial W_1(x_i)}{\partial x_i} + \frac{1}{\theta} \frac{\partial \Psi(x_i)}{\partial x_i} W_1(x_i) + \frac{1}{\theta} \sum_{j \neq i}^N \int_{x_j} \frac{\partial \Psi(x_i, x_j)}{\partial x_i} W_2(x_i, x_j) dx_j = 0. \quad (2)$$

Напомним, что W_1 и W_2 имеют смысл условных функций распределения, когда вероятности флуктуаций в одной и двух избранных ячейках определяются при соответствующем дополнительном условии, накладываемом на распределение флуктуаций во всех остальных ячейках. Это позволяет строить теорию флуктуаций в порядке последовательных приближений, на чем и основан статистический метод условных распределений. В данном случае рассматривается аналог первого F_{11} -приближения, когда в каждой молекулярной ячейке может быть не более одной частицы ($0 \leq n_k \leq 1$).

СТАТИСТИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОГО ГАМИЛЬТОНИАНА ДЛЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ГАУССА

Выбор эффективного гамильтониана, являющегося функционалом от поля плотности параметра порядка [1], составляет первооснову феноменологической флуктуационной теории [2]. Если эффективный гамильтониан рассматривать (как первое гармоническое приближение) в виде квадратичной формы в распределении Гаусса, то теория сразу же сталкивается с неизвестной матрицей коэффициентов, определяющей указанную квадратичную форму. Имеющая место неопределенность, как будет показано, может быть разрешена статистически в рамках гибковского формализма. Эта цель достижима не только для гармонического приближения, но и с учетом последующих членов разложения — ангармонизмов различного порядка.

В [3] было показано, что в развиваемой теории эффективный гамильтониан флуктуаций плотности может быть представлен как гамильтониан парных взаимодействий квазичастиц, находящихся во внешнем поле. При этом квазичастицы представляют собой флуктуации плотности в молекулярных ячейках, на которые мысленно разбит весь объем системы. Для указанных квазичастиц определены как соответствующие корреляционные функции (унарная, бинарная и т. д.), так и определяющие их интегро-дифференциальные уравнения. Теория получается в виде далеко идущей аналогии с теорией коррелятивных функций условных распределений [4].

Эффективный гамильтониан флуктуаций плотности $\Omega\{n_k\}$ может быть представлен в виде разложения по одночастичным $\Psi(x_i)$, двухчастичным $\Psi(x_i, x_j)$ и т. д. эффективным потенциалам

$$\Omega\{n_k\} = \Omega(\bar{n}) + \sum_{i=1}^N \Psi(x_i) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N \Psi(x_i, x_j) + \dots, \quad (1)$$

где n_k определяет плотность ρ_k в ячейке объема ω с номером k ($\rho_k = n_k/\omega$); \bar{n} — среднее значение; $x_i = n_i - \bar{n}$, а фигурные скобки обозначают совокупность значений плотности по всем ячейкам системы.

Если далее через $W_1(x_i)$ и $W_2(x_i, x_j)$ обозначить соответственно унарную и бинарную функции распределения флуктуаций плотности (условные пространственные корреляционные функции), то первое уравнение бесконечной цепочки зацепляющихся интегро-дифференциальных уравнений имеет вид

$$\frac{\partial W_1(x_i)}{\partial x_i} + \frac{1}{0} \frac{\partial \Psi(x_i)}{\partial x_i} W_1(x_i) + \frac{1}{0} \sum_{j=1}^N \int_{x_j} \frac{\partial \Psi(x_i, x_j)}{\partial x_i} W_2(x_i, x_j) dx_j = 0. \quad (2)$$

Напомним, что W_1 и W_2 имеют смысл условных функций распределения, когда вероятности флуктуаций в одной и двух избранных ячейках определяются при соответствующем дополнительном условии, накладываемом на распределение флуктуаций во всех остальных ячейках. Это позволяет строить теорию флуктуаций в порядке последовательных приближений, на чем и основан статистический метод условных распределений. В данном случае рассматривается аналог первого F_{11} -приближения, когда в каждой молекулярной ячейке может быть не более одной частицы ($0 \leq n_i \leq 1$).

Как было показано в [3], распределение по переменным x_k имеет вид

$$Z \{x_k\} = A \exp \left\{ -\frac{\Omega \{x_k\}}{\theta} \right\}, \quad (3)$$

где $\Omega \{x_k\} = \Omega \{n_k\} - \Omega(\bar{n})$, $A = Z^{-1} \exp \left\{ -\frac{\Omega(\bar{n})}{\theta} \right\}$, а Z — большая статсумма, вычисленная с учетом флуктуаций плотности.

Используя разложение по степеням x_i , можно в первом приближении ограничиться распределением Гаусса

$$Z \{x_k\} \simeq B \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \beta_{ij} x_i x_j \right\}, \quad (4)$$

где коэффициенты β_{ij} , являющиеся функциями положения ячеек в конфигурационном пространстве, подлежат определению.

Воспользуемся общим выражением для эффективного гамильтониана плотности (см. (1—4) из [3]):

$$\Omega \{n_k\} = - \sum_{i=1}^N (\mu n_i + \theta \ln G_i \{n_k\}), \quad (5)$$

$$G_i \{n_k\} = \omega^{n_i-1} n_i^{-n_i} (1 - n_i)^{-(1-n_i)} Q_i^{1/2} \{n_k\},$$

который является функцией N переменных n_k (функционалом при $N \rightarrow \infty$), задающих поле неоднородного распределения плотности. Величина n_i является локальной концентрацией частиц «двухкомпонентной» системы, образованной из молекул изучаемой чистой системы (частицы сорта a) и не взаимодействующих частиц сорта b , находящихся в пустых ячейках ($N = N_a + N_b$).

Явное выражение для $G_i \{n_k\}$ получается путем обобщения процедуры расчета конфигурационного интеграла однородной системы (см. гл. V [4]) на случай неоднородного распределения плотности. Зависимость $Q_i \{n_k\}$ от поля плотности передается выражением (IX.20) из [4], которое в случае трехмерного неоднородного распределения плотности будет иметь следующий вид:

$$Q_i \{n_k\} = \prod_{\mu=a,b} (Q_i^\mu)^{2n_i^\mu} \prod_{j \neq i, \mu, \nu=a,b} (Q_{ij}^{\mu\nu} / Q_i^\mu Q_j^\nu)^{n_i^\mu n_j^\nu}, \quad (6)$$

где

$$Q_i^\mu \{n_k\} = \int_{\omega_i} \exp \left\{ -\frac{1}{\theta} \sum_{j \neq i} \varphi_{ij}(\mathbf{q}_\mu^i, \{n_k\}) \right\} d\mathbf{q}_\mu^i, \quad (7a)$$

$$Q_{ij}^{\mu\nu} \{n_k\} = \int_{\omega_i} \int_{\omega_j} \exp \left\{ -\frac{1}{\theta} \left[\Phi(|\mathbf{q}_\mu^i - \mathbf{q}_\nu^j|) + \sum_{k \neq i,j} \varphi_{ik}(\mathbf{q}_\mu^i, \{n_k\}) + \sum_{h \neq i,j} \varphi_{jh}(\mathbf{q}_\nu^j, \{n_k\}) \right] \right\} d\mathbf{q}_\mu^i d\mathbf{q}_\nu^j. \quad (7b)$$

Здесь $n_i^a = n_i$; $n_i^b = 1 - n_i$; $\Phi(|\mathbf{q}_\mu^i - \mathbf{q}_\nu^j|)$ — потенциал межмолекулярного взаимодействия ($\Phi_{ab} = \Phi_{ba} = 0$); $\varphi_{ij}(\mathbf{q}_\mu^i, \{n_k\})$ — потенциал средних сил взаимодействия частицы сорта μ в положении \mathbf{q}^i в ячейке ω^i с частицами, распределенными в ячейке ω_j . Потенциалы φ являются решением замкнутой системы интегральных уравнений, полученной в результате обрыва цепочки интегро-дифференциальных уравнений для коррелятив-

ных функций в системе с неоднородным распределением плотности и использования приближенной нормировки двухчастичных коррелятивных функций [4]. Используя систему (IX.4) из [4] и учитывая в явном виде тот факт, что $\Phi_{ab} = \Phi_{bb} = 0$, получим после соответствующей перенормировки потенциалов средних сил (подобной той, что использовалась в однородных системах [4, 5]):

$$\exp\left\{-\frac{1}{\theta}\varphi_{ij}\right\} = n_j \exp\left\{-\frac{1}{\theta}\varphi_{ij}^{(a)}\right\} + (1 - n_j) \times \\ \times \left\langle \exp\left\{-\frac{1}{\theta}\varphi_{ij}^{(a)}\right\} \right\rangle'_i \quad (8)$$

$$\exp\left\{-\frac{1}{\theta}\varphi_{ij}^{(a)}\right\} \equiv \left\langle \exp\left\{-\frac{1}{\theta}\Phi_{ij}\right\} \right\rangle'_i = \\ = \frac{\int_{\omega_j} \exp\left\{-\frac{1}{\theta}\left[\Phi_{ij} + \sum_{k \neq i, j}^N \varphi_{jk}\right]\right\} dq^i}{\int_{\omega_j} \exp\left\{-\frac{1}{\theta}\sum_{k \neq i, j}^N \varphi_{jk}\right\} dq^i} \quad (9)$$

$$\left\langle \exp\left\{-\frac{1}{\theta}\varphi_{ij}^{(a)}\right\} \right\rangle'_i = \frac{\int_{\omega_i} \exp\left\{-\frac{1}{\theta}\left[\varphi_{ij}^a + \sum_{k \neq i, j}^N \varphi_{ik}\right]\right\} dq^i}{\int_{\omega_i} \exp\left\{-\frac{1}{\theta}\sum_{k \neq i, j}^N \varphi_{ik}\right\} dq^i} \quad (10)$$

Потенциалы $\varphi_{ij}(\mathbf{q}^i, \{n_k\})$ как решение системы (8—10) являются функциями положения частиц в ячейках и функционалами от поля плотности в системе. Прямой метод их отыскания путем решения системы (8) — (10) представляется затруднительным, поскольку необходимо решить систему уравнений, «охватывающую» всю неоднородную часть объема, которая в общем случае и занимает весь объем $V (V \rightarrow \infty)$. Поэтому, как это и было уже отмечено выше, эффективный гамильтониан, а значит, и все функционалы, его определяющие, разложим в ряды по отклонению плотности в каждой ячейке от некоторого ее значения \bar{n}_k (например, среднего) и ограничимся линейным приближением, когда

$$\varphi_{ij}(\mathbf{q}^i, \{n_k\}) \simeq \varphi_{ij}(\mathbf{q}^i, \bar{n}) - \theta \sum_{p=1}^N a_{ij}^{(p)}(\mathbf{q}^i, \bar{n})(n_p - \bar{n}). \quad (11)$$

Здесь $a_{ij}^{(p)} = -\frac{1}{\theta} \frac{\partial \varphi_{ij}}{\partial n_p} \Big|_{\{n_k\}=\{\bar{n}\}}$ является фактически функцией отклика для потенциала средних сил, определяющей изменение потенциала средних сил взаимодействия частицы в ячейке ω_i с молекулами, распределенными в ячейке ω_j , при изменении плотности в ячейке с номером p , причем плотность во всех остальных ячейках равна $\bar{n} (\{n_k\} = \{\bar{n}\})$.

Систему определяющих уравнений для коэффициентов разложения $a_{ij}^{(p)}$ получим, дифференцируя (8) с учетом (9, 10) по плотности и полагая далее все n_k равными \bar{n} . Имея в виду применение развиваемой теории к описанию конденсированного, и в первую очередь кристаллического, состояния вещества, возьмем в данной работе в качестве однородного распределения поле $\{n_k\} = 1$ (это соответствует разложению относительно распределения, описываемого первым F_{11} -приближением метода условных распределений с одночастичным заполнением ячеек). В этом случае система уравнений для коэффициентов $a_{ij}^{(p)}$ имеет наиболее простой вид

$$a_{ij}^{(p)}(q^i, 1) = \sum_{k \neq i, j}^N \langle B_{ij}(q^i, q^j, 1) a_{ik}^{(p)} \rangle_i + C_{ij}(q^i, 1) \delta_{jp}, \quad (12)$$

$$B_{ij}(q^i, q^j, 1) = \exp \left\{ -\frac{1}{\theta} [\Phi(|q^i - q^j|) - \varphi_{ij}(q^i, 1)] \right\} - 1, \quad (13)$$

$$C_{ij}(q^i, 1) = 1 - \left\langle \exp \left\{ -\frac{1}{\theta} \varphi_{ij}(q^i, 1) \right\} \right\rangle_i \exp \left\{ \frac{1}{\theta} \varphi_{ij}(q^i, 1) \right\}. \quad (14)$$

Здесь δ_{jp} — символ Кронекера. Усреднение в (12), (14) имеет тот же смысл, что и в (8) — (10), однако сейчас уже при усреднении используются потенциалы средних сил, которые являются решением уравнений (8) — (10) для системы с однородным распределением плотности по объему ($n_k=1$). В этом случае, как это и должно быть, система (8) — (10) преобразуется к системе интегральных уравнений для потенциалов средних сил однородной системы в F_{11} -приближении (см. IV [4]), решение которой получено ранее с помощью ЭВМ «Минск-22» методом итераций в широкой области термодинамических переменных.

Заметим далее, что если в (12) суммирование по $k \neq i, j$ заменить формально на интегрирование по объему $V - \omega_i - \omega_j$, то система (12) переходит в систему линейных интегральных уравнений со свободным членом в виде дельтаобразного источника в точке g_j , совпадающей с ячейкой ω_j . Следовательно, уравнение (12) является разностным аналогом уравнения типа Фредгольма 2-го рода (см. [6]) в трехмерном пространстве.

Разлагая функционалы, стоящие в правой части выражения (6), примем во внимание разложение (11) для потенциала $\varphi_{ij}(q^i, \{n_k\})$. Тогда в линейном приближении получим

$$Q_i^a = Q_i(1) \left(1 + \sum_{p=1}^N \sum_{k \neq i}^N \langle a_{ik}^{(p)} \rangle_i x_p \right), \quad x_p = n_p - 1 \leq 0, \quad (15)$$

$$\frac{Q_{ij}^{aa}}{Q_i^a Q_j^a} = \langle f_{ij}^{-1} \rangle_i \left[1 - \sum_{p=1}^N (\langle a_{ij}^{(p)} \rangle_i + \langle a_{ji}^{(p)} \rangle_j) x_p \right], \quad (16)$$

$$f_{ij}(q^i, 1) \equiv \exp \left\{ -\frac{1}{\theta} \varphi_{ij}(q^i, 1) \right\}. \quad (17)$$

Здесь и далее обозначение $\langle \dots \rangle_i$ в отличие от $\langle \dots \rangle_i'$ означает усреднение, выполненное с помощью нормированной на единицу унарной коррелятивной функции $\bar{F}_{11}(q^i, 1)$ для однородной среды с плотностью $\bar{n}=1$ (на это указывает единица, стоящая на месте аргумента: $Q_i(1)$, $\bar{F}_{11}(q^i, 1)$ и т. д.):

$$\langle a_{ik}^{(p)} \rangle_i = \int_{\omega_i} a_{ik}^{(p)}(q^i, 1) \bar{F}_{11}(q^i, 1) dq^i, \quad (18)$$

$$\bar{F}_{11}(q^i, 1) = Q_i^{-1}(1) \exp \left\{ -\frac{1}{\theta} \sum_{j \neq i}^N \varphi_{ij}(q^i, 1) \right\}, \quad (19)$$

$$Q_i(1) = \int_{\omega_i} \exp \left\{ -\frac{1}{\theta} \sum_{j \neq i}^N \varphi_{ij}(q^i, 1) \right\} dq^i. \quad (20)$$

При разложении функционалов, содержащих индексы с $\mu, \nu = b$, учтем, что частицы сорта b не взаимодействуют с частицами сорта a . В связи с этим

$$f_{ij}(q_b^i) = 1, \quad Q_i^b \{n_k\} = \omega, \quad Q_{ij}^{bb} | Q_i^b Q_j^b = 1, \quad (21)$$

$$\frac{Q_{ij}^{ba}}{Q_i^b Q_j^a} = \langle \bar{f}_{ij}^{-1} \rangle_i + \sum_{p=1}^N \sum_{k \neq i, j}^N \langle \bar{f}_{ji}^{-1} a_{jk}^{(p)} \rangle_j x_p - \sum_{p=1}^N \sum_{k \neq j}^N \langle \bar{f}_{ji}^{-1} \rangle_j \langle a_{jk}^{(p)} \rangle_j x_p. \quad (22)$$

Выражение (22) упрощается, если воспользоваться результатом усреднения (12) с помощью унарной коррелятивной функции $F_{11}(q^i, 1)$. Для этого домножим (22) на F_{11} (см. (19)) и проинтегрируем по q^i в пределах ячейки ω_i . Принимая во внимание (13, 14), получим

$$\langle \langle B_{ij} a_{jk}^{(p)} \rangle_j \rangle_i = \langle a_{jk}^{(p)} \rangle_j - \langle a_{jk}^{(p)} \rangle_j = \langle a_{jk}^{(p)} \rangle_j - \langle \bar{f}_{ji}^{-1} a_{jk}^{(p)} \rangle_j / \langle \bar{f}_{ji}^{-1} \rangle_j, \quad (23)$$

$$\langle C_{ij}(q^i, 1) \rangle_i = 0, \quad (24)$$

$$\langle \bar{f}_{ji}^{-1} \rangle_j \langle a_{ij}^{(p)} \rangle_i = \sum_{k \neq i, j}^N \langle \bar{f}_{ji}^{-1} \rangle_j \langle a_{jk}^{(p)} \rangle_j - \langle \bar{f}_{ji}^{-1} a_{jk}^{(p)} \rangle_j. \quad (25)$$

Из последнего уравнения следует, что

$$\sum_{k \neq i, j}^N \langle \bar{f}_{ji}^{-1} a_{jk}^{(p)} \rangle_j = \sum_{k \neq i, j}^N \langle \bar{f}_{ji}^{-1} \rangle_j \langle a_{jk}^{(p)} \rangle_j - \langle \bar{f}_{ji}^{-1} \rangle_j \langle a_{ij}^{(p)} \rangle_i, \quad (26)$$

и после подстановки в (22) запишем окончательно

$$\frac{Q_{ij}^{ba}}{Q_i^b Q_j^a} = \langle \bar{f}_{ij}^{-1} \rangle_i \left[1 - \sum_{p=1}^N (\langle a_{ij}^{(p)} \rangle_i + \langle a_{ij}^{(p)} \rangle_j) x_p \right], \quad \langle \bar{f}_{ij}^{-1} \rangle_i = \langle \bar{f}_{ji}^{-1} \rangle_j. \quad (27)$$

Выражение, аналогичное (27), получается и для функционала $Q_{ij}^{ab}/Q_i^a Q_j^b$. Теперь, подставляя (15, 16, 21, 27) в (6) и принимая во внимание (4), (5), получим явное выражение для эффективного гамильтониана плотности:

$$\begin{aligned} \Omega \{n_k\} = & -\theta \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{\mu}{\theta} n_i - n_i \ln n_i - (1 - n_i) \ln(1 - n_i) + n_i \ln Q_i(1) + \right. \\ & + n_i \ln \left(1 + \sum_{p=1}^N \sum_{k \neq i, j}^N \langle a_{ik}^{(p)} \rangle_i x_p \right) + \sum_{j \neq i}^N \frac{(n_i + n_j - n_i n_j)}{2} \times \\ & \left. \times \left[\ln \langle \bar{f}_{ij}^{-1} \rangle_i + \ln \left(1 - \sum_{p=1}^N (\langle a_{ij}^{(p)} \rangle_i + \langle a_{ij}^{(p)} \rangle_j) x_p \right) \right] \right\}. \quad (28) \end{aligned}$$

Разлагая логарифмы, содержащие линейные по $\langle a_{ij}^{(p)} \rangle_i x_p$ слагаемые, и группируя отдельные члены, отвечающие за одно-, двух- и трехчастичные взаимодействия флуктуаций, запишем

$$\begin{aligned} \Omega \{n_k\} = & -\theta N \left(\frac{\mu}{\theta} + \ln Q_i(1) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i}^N \ln \langle \bar{f}_{ij}^{-1} \rangle_i \right) - \\ & - \theta \sum_{i=1}^N \left[\left(\frac{\mu}{\theta} + \ln Q_i(1) \right) x_i + x_i \ln(-x_i) - (1 + x_i) \ln(1 + x_i) + \right. \\ & + \sum_{k \neq i}^N \langle a_{ik}^{(i)} \rangle_i x_i^2 \left. \right] - \theta \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N \left[\sum_{k \neq i}^N \langle a_{ik}^{(i)} \rangle_i x_i x_j - \frac{1}{2} \ln \langle \bar{f}_{ij}^{-1} \rangle_i x_i x_j + \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} (\langle a_{ij}^{(i)} \rangle_i + \langle a_{ij}^{(i)} \rangle_j) x_i^2 x_j + \frac{1}{2} (\langle a_{ij}^{(i)} \rangle_i + \langle a_{ij}^{(i)} \rangle_j) x_i x_j^2 \right] - \end{aligned}$$

$$-\frac{1}{2} \theta \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N \sum_{p \neq i, j}^N (\langle a_{ij}^{(p)} \rangle_i + \langle a_{ij}^{(p)} \rangle_j) x_i x_j x_p. \quad (29)$$

Сравнение (29) с представлением (1) для эффективного гамильтониана флуктуаций плотности приводит в данном случае ($\bar{n}=1$) к следующим выражениям для двух младших эффективных потенциалов взаимодействия флуктуаций плотности ($\Omega(1)$ — термодинамический потенциал $\Omega = -PV$ в первом F_{11} -приближении метода условных распределений; P — давление):

$$\Omega(1) = -\theta \frac{V}{\omega} \left(\frac{\mu}{\theta} + \ln Q + \frac{1}{2} \sum_{j \neq 1}^N \ln \langle \bar{f}_{ij}^{-1} \rangle_i \right), \quad (30)$$

$$\Psi(x_i) = -\theta \left[\left(\frac{\mu}{\theta} + \ln Q \right) x_i + x_i \ln(-x_i) - (1 + x_i) \ln(1 + x_i) + \sum_{k \neq i}^N \langle a_{ik}^{(i)} \rangle_i x_i^2 \right], \quad (31)$$

$$\Psi(x_i, x_j) = -\theta \{ -\ln \langle \bar{f}_{ij}^{-1} \rangle_i + (\langle a_{ij}^{(i)} \rangle_i + \langle a_{ij}^{(i)} \rangle_j) x_i + (\langle a_{ij}^{(j)} \rangle_i + \langle a_{ij}^{(j)} \rangle_j) x_j x_i x_j + 2 \sum_{k \neq i}^N \langle a_{ik}^{(i)} \rangle_i x_i x_j \}. \quad (32)$$

Таким образом, полученные явные выражения для эффективных потенциалов Ψ создают реальную основу для практической реализации идеи о сокращенном описании в теории флуктуаций с помощью системы (2) для функций W , определяющих распределение флуктуаций плотности в объеме.

Осуществление такой программы в полном объеме требует привлечения ЭВМ для решения полученных здесь и ранее в [3] замкнутых систем уравнений, определяющих эффективные потенциалы Ψ и функции распределения W . Вместе с тем имеется возможность продвинуться дальше в аналитических расчетах (без привлечения ЭВМ), если ограничиться для эффективного гамильтониана Ω выражением в виде квадратичной формы (в дальнейшем можно учесть вклад от ангармонизмов высших порядков). Для этого разложим Ω как функционал поля плотности в ряд по отношению к наиболее вероятному полю, которое в квадратичном приближении совпадает с полем, образованным средними значениями \bar{x}_h в каждой ячейке (для однородных систем в отсутствие внешних полей, очевидно, все $\bar{x}_h = \bar{x}$ ($h = 1, 2, \dots$)).

Выполняя это разложение и сопоставляя выражения (3, 4), получим

$$\beta_{ij} = \begin{cases} \frac{1}{\theta} \frac{\partial^2 \Omega}{\partial x_i^2} \Big|_{x_h = \bar{x}} = \frac{1}{\theta} \left(\frac{\partial^2 \Psi(x_i)}{\partial x_i^2} \Big|_{x_i = \bar{x}} + \sum_{k=1}^N \frac{\partial^2 \Psi(x_i x_k)}{\partial x_i^2} \Big|_{x_i, x_k = \bar{x}} \right), & j = i, \\ \frac{1}{\theta} \frac{\partial^2 \Omega}{\partial x_i \partial x_j} \Big|_{x_h = \bar{x}} = \frac{1}{\theta} \frac{\partial^2 \Psi(x_i, x_j)}{\partial x_i \partial x_j} \Big|_{x_i, x_j = \bar{x}}, & j \neq i. \end{cases} \quad (33)$$

Запишем далее окончательное выражение для коэффициента β_{ij} ($j \neq i$):

$$\beta_{ij} = \ln \langle \bar{f}_{ij}^{-1} \rangle_i - 2 \sum_{k \neq i}^N \langle a_{ik}^{(i)} \rangle_i - 4 \langle a_{ij}^{(i)} \rangle_i + \langle a_{ij}^{(j)} \rangle_i | \bar{x}, \quad (34)$$

который описывает взаимодействие между флуктуациями в двух точках \mathbf{r}_i и \mathbf{r}_j и поэтому (как будет видно из дальнейшего) определяет характер корреляции между флуктуациями плотности.

Коэффициенты $a_{ij}^{(p)}$, определяющие эффективные потенциалы, удовлетворяют системе (12). Структура этой системы указывает на то, что механизм взаимодействия флуктуаций плотности носит коллективный характер. Это особенно наглядно проявляется в случае одномерной задачи, когда имеется один ряд из N ячеек. Предположим, что взаимодействие между частицами системы короткодействующее и поэтому распространяется только на частицы в соседних ячейках. Тогда в системе (12) от суммы по $k \neq i, j$ останется только одно слагаемое при $k=j+1$, так как отличны от нуля только те φ_{jk} (а значит, и $a_{jk}^{(p)}$), для которых j и k являются номерами ближайших соседей. Если далее разложить $B_{ij}(\mathbf{q}^i, \mathbf{q}^j)$, $C_{ij}(\mathbf{q}^i)$ и все $a_{ij}^{(p)}(\mathbf{q}^i)$ в ряды по смещениям частиц из центров ячеек ($\mathbf{q}^i = \mathbf{r}_i + \mathbf{u}_i$) и ограничиться нулевым приближением, то система интегральных уравнений преобразуется в систему линейных алгебраических уравнений вида

$$a_1^{(l)} = B_1 a_1^{(l-1)} + C_1 \delta_{0l}. \quad (35)$$

Здесь $a_1^{(l)} \equiv a_{ij}^{(p)}(0)$, $B_1 \equiv B_{ij}(0, 0, 1)$, $a_1^{(l-1)} \equiv a_{jk}^{(p)}(0)$, $C_1 \equiv C_{ij}(0, 1)$ определяют значения соответствующих функций (см. (12)–(14)), вычисленных в центрах ячеек (на это указывает нуль, стоящий на месте соответствующего аргумента). Нижний индекс отмечает тот факт, что все эти величины относятся к парам соседних ячеек. При переходе от (12) к системе (35) следует принять во внимание, что коэффициенты $a_{ij}^{(p)}$ и $a_{jk}^{(p')}$ равны, если ячейки с номерами p и p' одинаково расположены по отношению к ячейкам ij и jk . Другими словами, эти величины как функции координат ($a_{ij}^{(p)} = f(\mathbf{q}^i)$ и $a_{jk}^{(p')} = f(\mathbf{q}^j)$) имеют один и тот же функциональный вид в «собственных» системах координат, связанных одинаковым образом с соответствующими парами ячеек. Здесь начало координат совмещено с центром ячейки j для пары ij и с центром ячейки k для пары jk . Индекс l как раз и определяет положение ячейки p в соответствующей собственной системе координат (для данного одномерного случая $p-j=l$, $p-k=l-1$, так как $k=j+1$ — ближайшие соседи).

Система (35) интересна тем, что имеет точное аналитическое решение (Δy — расстояние между центрами ближайших ячеек)

$$a_1(y_l) = \begin{cases} C_1 \exp\{-k_l y_l\}, & k_l = -\frac{1}{\Delta y} \ln B_1, \quad l \geq 0, \\ 0, & y_l = \Delta y \cdot l, \quad l < 0, \end{cases} \quad (36)$$

что и позволяет установить характер распространения взаимодействия флуктуаций плотности и его связь с межмолекулярным взаимодействием и коллективным поведением среды, описываемым коррелятивными функциями. В самом деле, для данной одномерной модели среды характерно наличие дальнего действия во взаимодействии флуктуаций плотности (32), (34), (36), тогда как принятое межмолекулярное взаимодействие ($B_1 \neq 0$, $C_1 \neq 0$, B_k и $C_k = 0$ при $k \neq 1$) распространялось только на молекулы в ближайших ячейках. Дальнее действие связано с эстафетным механизмом передачи возмущения от ячейки с номером l (или p в трехмерном варианте), в которой имеют место флуктуации плотности, на взаимодействие частицы в ячейке i с молекулами, распределенными в ячейке j . Это влияние на потенциал $\varphi_{ij}(\mathbf{q}^i, \{n_k\})$ описывается здесь с помощью коэффициентов $a_{ij}^{(p)} = a_1^{(l)}$, удовлетворяющих в случае одномерной цепочки системе (35) и определяемых ее решением в виде (36). В результате, как это видно из (32), потенциал $\Psi(x_i, x_j)$, описывающий взаимодействие флуктуаций в ячейках ω_i и ω_j ($j \neq i$), наряду с короткодействующей частью (выражение в квадратных скобках), отличной от

нуля только для ближайших ячеек, содержит еще и «длиннодействующий хвост» вида (одномерная цепочка ячеек)

$$\sum_{k \neq i}^N \langle a_{ik}^{(D)} \rangle_i x_i x_j = C_i x_i x_j \exp \{ -k_1 (|y_j - y_i| - \Delta y) \}, \quad j \neq i. \quad (37)$$

Понятно, что все корреляционные эффекты будут непосредственно связаны с этой частью эффективного потенциала $\Psi(x_i, x_j)$. Это видно на примере пространственного коррелятора флуктуаций плотности

$$\langle \Delta n_i \Delta n_j \rangle = \langle x_i x_j \rangle - \langle x_i \rangle^2, \quad (38)$$

$$\langle x_i x_j \rangle = \int_{x_i x_j} x_i x_j W_2(x_i x_j) dx_i dx_j,$$

$$\langle x_i \rangle = \int_{x_i} x_i W_1(x_i) dx_i.$$

Выражения для одночастичной и двухчастичной условных корреляционных функций флуктуаций плотности, полученных в [3] после обрыва и замыкания системы (2),

$$W_1(x_i) = C_i \exp \left\{ -\frac{1}{\theta} \left[\Psi(x_i) + \sum_{j \neq i}^N \gamma_{ij}(x_i) \right] \right\}, \quad (39)$$

$$W_2(x_i, x_j) = \lambda_{ij} \exp \left\{ -\frac{1}{\theta} \left[\Psi(x_i) + \Psi(x_j) + \Psi(x_i, x_j) + \sum_{k \neq i, j}^N \gamma_{ik}(x_i) + \sum_{k \neq i, j}^N \gamma_{jk}(x_j) \right] \right\}, \quad (40)$$

содержат, как это и должно быть, одночастичные $\Psi(x_i)$ и двухчастичные $\Psi(x_i, x_j)$ эффективные потенциалы взаимодействия флуктуаций плотности, а также соответствующие им потенциалы γ_{ij} средних эффективных сил. Последние находятся из решения замкнутой системы интегральных уравнений [3], ядра которых выражаются через потенциалы $\Psi(x_i)$ и $\Psi(x_i, x_j)$.

В силу сказанного выше заметим, что зависимость коррелятора флуктуаций плотности от взаимного расстояния $r_j - r_i$, а значит, и его асимптотическое поведение определяются в первую очередь эффективным потенциалом $\Psi(x_i, x_j)$ (или коэффициентом β_{ij} в гармоническом приближении), который существенно зависит от состояния системы в целом.

Summary

The statistical expression for the effective Hamiltonian as a functional of the density field is presented in a form of a series of irreducible one-, two-, ... particle effective potentials of interaction of quasiparticles. Density fluctuations are recognized as the quasiparticles. The explicit expressions for the lowest potentials in harmonic approximation specify the quadratic form for the effective potential that corresponds to the Gaussian distribution for the density field.

Литература

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика.— М.: Наука, 1976, т. 5, ч. 1.— 584 с.
2. Паташинский А. З., Покровский В. Л. Флуктуационная теория фазовых переходов.— М.: Наука, 1975.— 256 с.
3. Паркевич И. Н. Сокращенное описание неоднородных систем на основе условных пространственных корреляционных функций плотности.— Вестн АН БССР, Сер. ф.-мат. наук, 1980, № 5, с. 107—112.

4. Ротт Л. А. Статистическая теория молекулярных систем.— М.: Наука, 1979.— 280 с.

5. Бокун Г. С., Вихренко В. С., Наркевич И. И., Ротт Л. А. Термодинамическая согласованность в проблеме нормировки коррелятивных функций многокомпонентных систем.— Весті АН БССР. Сер. фіз.-мат. навук, 1980, № 4, с. 104—108.

6. Краснов М. Л. Интегральные уравнения.— М.: Наука, 1975.— 304 с.

Белорусский технологический институт
им. С. М. Кирова

Поступила в редакцию
12.01.81

УДК 539.121.7

А. О. ГРУБИЧ

К КЛАССИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ КАНАЛИРОВАНИЯ

В работе [1] впервые было обращено внимание на то обстоятельство, что спонтанные радиационные переходы каналирующих частиц между уровнями (зонами) их поперечной энергии могут оказать существенное влияние на движение частиц в кристалле. В рамках классической теории указанное явление, заключающееся в изменении траектории заряженной частицы под действием силы радиационного трения, а также многократное рассеяние и потери полной энергии каналируемых частиц рассматриваются в цикле работ [2—4].

В настоящем сообщении исследована область применимости линейного решения классического уравнения движения, с помощью которого получены простые выражения, позволяющие оценить длину деканалирования и радиационные потери энергии каналирующих частиц.

1. Уравнение движения заряженной частицы во внешнем электромагнитном поле, учитывающее влияние силы радиационного трения на траекторию движения частицы (уравнение Дирака — Лоренца), может быть записано в следующем удобном для дальнейшего анализа виде ($C=1$):

$$\mathbf{W} - \frac{\mathbf{F}_L - \mathbf{V}(\mathbf{V}\mathbf{F}_L)}{m\gamma} = \frac{2}{3} r_e \gamma \{ \mathbf{W}' + 3\gamma^2 \mathbf{W}(\mathbf{V}\mathbf{W}) \}, \quad (1)$$

$$\gamma' - \frac{\mathbf{V}\mathbf{F}_L}{m} = \frac{2}{3} r_e \gamma^4 \mathbf{V} \{ \mathbf{W}' + 3\gamma^2 \mathbf{W}(\mathbf{V}\mathbf{W}) \}, \quad (2)$$

где \mathbf{V} и \mathbf{W} — скорость и ускорение частицы соответственно; $\mathbf{W}' = d\mathbf{W}/dt$; $r_e = e^2/m$ — классический радиус электрона; \mathbf{F}_L — сила Лоренца; $\gamma = (1 - V^2)^{-1/2}$ — лоренц-фактор частицы. В немагнитном кристалле $\mathbf{F}_L = -\nabla U_\alpha$, где U_α — потенциальная энергия взаимодействия частицы с кристаллографическими осями $\alpha = R$ (плоскостями $\alpha = P$), усредненная по тепловым колебаниям кристаллической решетки [5]. Напомним, что уравнение (2) является следствием уравнения (1) и формулы $\gamma' = (1 - V^2)^{-3/2} \mathbf{V} \cdot \mathbf{W}$ и может быть записано, например, в виде $\gamma' = \gamma^3 \mathbf{V}\mathbf{W}$.

Как известно, уравнение (1) применимо, когда сила радиационного трения $\mathbf{F}_{\text{рад}} \ll \mathbf{F}_L$. Поэтому обычно пользуются приближенным уравнением, которое получается при подстановке в правую часть (1) ускорения частицы, выраженного через действующее на частицу внешнее электромагнитное поле [6]:

$$\mathbf{W}^{(0)} = (\mathbf{F}_L - \mathbf{V}(\mathbf{V}\mathbf{F}_L))/m\gamma. \quad (3)$$

Условие малости силы радиационного трения $\mathbf{F}_{\text{рад}}$ по сравнению с действующей на заряд внешней силой \mathbf{F}_L имеет вид $\gamma \ll \gamma_{\text{кр}} = m/r_e |\mathbf{F}_L|$. Однако классическая электродинамика становится неприменимой вследствие рождения электронно-позитронных пар во внешнем элект-