

больших значений константы связи. Следует ожидать, что его можно использовать и в промежуточной области значений константы связи, недоступной для других методов исследования.

Summary

With reference to the example of a static source with internal degrees of freedom interacting with a quantum field, it is shown that an exact account of the conservation laws allow evaluation of the energy of the ground state of the system without any constraints on the coupling constant. For constructing the projection operators a use has been made of the vector Fedorov parametrization of the rotation group.

Литература

1. Хенли Э., Тирринг В. Элементарная квантовая теория поля.— М.: ИЛ, 1963.— 315 с.
2. Паули В.— Тр. по квантовой теории.— М.: Наука, 1977, с. 424—466.
3. Боголюбов Н. Н.— Укр. мат. журн., 1950, т. 2, № 2, с. 3—24.
4. Федоров Ф. И. Группа Лоренца.— М.: Наука, 1979.— 384 с.
5. Завтрак С. Т., Комаров Л. И., Феранчук И. Д.— Теор. и мат. физ., 1981, т. 47, № 1, с. 55—66.
6. Бейтмен Г., Эрдейи А. Высшие трансцендентные функции.— М.: Наука, 1965, т. 1.— 296 с.

Белорусский государственный университет
им. В. И. Ленина

Поступила в редакцию
13.12.82

УДК 531.19+531.391

В. С. ВИХРЕНКО, М. И. КУЛАК

ГРУППОВЫЕ РАЗЛОЖЕНИЯ В ТЕОРИИ ВРЕМЕННЫХ КОРРЕЛЯЦИОННЫХ ФУНКЦИЙ МОЛЕКУЛЯРНОГО КРИСТАЛЛА

Метод временных корреляционных функций, дающий универсальное микроскопическое описание отклика макроскопической системы на слабые внешние поля или пробные частицы, нашел многочисленные применения в анализе экспериментальных данных, относящихся к конденсированным системам. Развитию метода в значительной степени способствовало использование при расчете корреляционных функций общих методов кинетической теории, в частности, групповых разложений [1—3]. Вместе с тем при использовании групповых разложений, как и любых других, остается актуальным вопрос о роли старших членов разложений.

Общая теория временных корреляционных функций, имеющая в своей основе статистический метод условных распределений [4], была построена в [3, 5]. В [6] первое приближение теории использовано для вычисления корреляционных и спектральных характеристик молекулярного кристалла. Представляет интерес выяснить вклад второго приближения теории в описание динамического поведения системы.

Принятая в [6] методика использования сначала групповых разложений частичных функций по корреляциям, а затем разложений по ортогональным полиномам позволяет наглядно продемонстрировать процедуры замыкания и редукции исходной системы уравнений в частных производных к системе обыкновенных дифференциальных уравнений и выяснить физический смысл коэффициентов разложения. Однако использование этого порядка преобразований для дальнейшего продвижения по цепочке, т. е. формулировки уравнений для корреляционных добавок, их замыкания на третьем, четвертом и т. д. уравнениях и уче-

та старших полиномов ввиду возрастания сложности и объема выкладок, практически трудно осуществимо. Для упрощения выкладок произведем сперва разложение по полиномам Эрмита исходных частичных функций распределения, а затем коэффициенты этих разложений представим через корреляционные добавки. Естественно, изменение порядка выполняемых преобразований не влияет на общую идеологию предложенного в [3] подхода. Окончательные уравнения также одинаковы в обоих случаях.

Разложение исходных приведенных динамических функций [3] по полиномам Эрмита в пространстве импульсов запишем в виде

$$\begin{aligned} b_1(i; t) &= [b_1^{(0)}(q^i; t) + H^{(\alpha)}(p^i) b_1^{(\alpha)}(q^i; t) + \\ &+ H^{(\alpha\beta)}(p^i) b_1^{(\alpha\beta)}(q^i; t) + \dots] F_{11}(p^i), \\ b_2(i, j; t) &= [b_2^{(0,0)}(q^i, q^j; t) + H^{(\alpha)}(p^i) b_2^{(\alpha,0)}(q^i, q^j; t) + \\ &+ H^{(\alpha)}(p^j) b_2^{(0,\alpha)}(q^i, q^j; t) + \\ &+ H^{(\alpha)}(p^i) H^{(\beta)}(p^j) b_2^{(\alpha,\beta)}(q^i, q^j; t) + \dots] F_{11}(p^i) F_{11}(p^j), \end{aligned} \quad (1)$$

где $b_1(i; t)$, $b_2(i, j; t)$ — одно- и двухчастичные приведенные динамические функции; $b_1^{(0)}(q^i; t)$, $b_1^{(\alpha)}(q^i; t)$, $b_2^{(\alpha,0)}(q^i, q^j; t)$ — коэффициенты разложения приведенных динамических функций в ряд по тензорным полиномам Эрмита $H^{(\alpha)}(p^i)$, $H^{(\alpha,\beta)}(p^i)$, ранг полиномов определяется количеством верхних индексов; $F_{11}(p^i)$ — импульсная (максвелловская) часть равновесной функции условных распределений [4]. Здесь и в дальнейшем латинские индексы указывают номера частиц, а греческие — компоненты векторов и тензоров.

Поскольку уравнения для приведенных динамических функций b_1 , b_2 формально проще уравнений для корреляционных добавок β_1 , β_2 к функциям b_1 , b_2 (см. [3]), то разложение в импульсном пространстве по полиномам Эрмита уравнений для b_1 , b_2 можно произвести в общем виде с точностью до полиномов произвольного порядка.

Приведем некоторые соотношения из алгебры полиномов Эрмита. Здесь используются многомерные полиномы, определение которых приведено, например, в [7]. Условия ортонормированности могут быть записаны в виде

$$\int_{\Omega_p} \dots \int H^{(\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_n)}(p^i) H^{(\beta_1 \beta_2 \dots \beta_m)}(p^i) F_{11}(p^i) dp^i = \delta_{mn} \sum_{(j)}^{(n!)} \left(\prod_{l=1}^n \delta_{\alpha_l \beta_l} \right). \quad (2)$$

Суммирование здесь ведется по $n!$ перестановкам индексов $(\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_n)$ в произведениях. В результате для коэффициентов разложений в (1) можно получить соотношения

$$\int_{\Omega_p} \dots \int H^{(\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_n)}(p^i) b_1(i; t) dp^i = n! b_1^{(\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_n)}(q^i; t) \equiv n! b_1^{(\alpha_1 \dots \alpha_n)}(i; t). \quad (3)$$

Полезными для дальнейших выкладок оказываются следующие рекуррентные соотношения:

$$\frac{p^\alpha}{\sqrt{\theta}} H^{(\alpha_1 \dots \alpha_n)} = H^{(\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_n)} + \sum_{h=1}^n \delta_{\alpha \alpha_h} H^{(\alpha_1 \dots \alpha_{h-1} \alpha_{h+1} \dots \alpha_n)}, \quad (4)$$

$$\sqrt{\theta} \frac{\partial H^{(\alpha_1 \dots \alpha_n)}}{\partial p^\alpha} = \sum_{h=1}^n \delta_{\alpha \alpha_h} H^{(\alpha_1 \dots \alpha_{h-1} \alpha_{h+1} \dots \alpha_n)}. \quad (5)$$

Умножим первое уравнение цепочки для функций b_n [3]

$$\frac{\partial b_1(i; t)}{\partial t} + p_i^\alpha \frac{\partial b_1(i; t)}{\partial q_i^\alpha} = \sum_{j \neq i}^N \int_{v_j} \int_{\Omega_p} G_{ij}^\alpha \frac{\partial b_2(i, j; t)}{\partial p_i^\alpha} dq^j dp^j \quad (6)$$

ни полином n -го ранга $H^{(\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_n)}(p^i)$ и проинтегрируем в импульсном пространстве. С учетом соотношений (2) — (5) исходное уравнение (6) приобретает вид

$$\begin{aligned} & \frac{\partial b_1^{(\alpha_1 \dots \alpha_n)}(q^i; t)}{\partial t} + (n+1) \sqrt{\theta} \frac{\partial b_1^{(\alpha_1 \dots \alpha_n)}}{\partial q_i^\alpha} + \\ & + \frac{\sqrt{\theta}}{n} \sum_{k=1}^n \delta_{\alpha \alpha_k} \frac{\partial b_1^{(\alpha_1 \dots \alpha_{k-1} \alpha_{k+1} \dots \alpha_n)}}{\partial q_i^\alpha} = \\ & = -\frac{1}{n \sqrt{\theta}} \sum_{j=i}^n \int_{v_j} G_{ij}^{\alpha_k} b_2^{(\alpha_1 \dots \alpha_{k-1} \alpha_{k+1} \dots \alpha_n; 0)}(q^i, q^j; t) dq^j, \end{aligned} \quad (7)$$

где $G_{ij}^{\alpha_k} = -\frac{\partial \Phi_{ij}(|q^i - q^j|)}{\partial q_i^{\alpha_k}}$ — точечная сила, действующая со стороны

частицы j на частицу i . Из (7) легко получить явный вид уравнений для коэффициентов разложения одночастичной функции в (1). Используя определяющие уравнения для двух-, трех-, четырехчастичных приведенных динамических функций, можно аналогичным образом получить уравнения и для остальных коэффициентов в разложении (1).

Далее перейдем к дифференциальным уравнениям второго порядка по времени, что позволит сократить количество рассматриваемых уравнений. С этой целью дифференцируем уравнение для $b_1^{(\alpha)}(q^i; t)$ по времени и используем для исключения первых производных по времени следующие из (1) уравнения для $b_1^{(0)}$, $b_1^{(\alpha_1 \alpha_2)}$, $b_2^{(0,0)}$. В результате коэффициенты при четных полиномах исчезают из уравнения и окончательно получим

$$\begin{aligned} & \frac{\partial^2 b_1^{(\alpha_1)}(q^i; t)}{\partial t^2} - 2\theta \frac{\partial^2 b_1^{(\alpha)}}{\partial q_i^\alpha \partial q_i^{\alpha_1}} - \theta \frac{\partial^2 b_1^{(\alpha_1)}}{\partial q_i^\alpha \partial q_i^\alpha} - 6\theta \frac{\partial^2 b_1^{(\alpha \alpha_1 \alpha_2)}}{\partial q_i^\alpha \partial q_i^{\alpha_1}} - \\ & - \sum_{j \neq i}^N \frac{\partial}{\partial q_i^\alpha} \int_{v_j} \{ G_{ij}^{\alpha_1} b_2^{(\alpha_1, 0)}(q^i, q^j; t) + G_{ij}^{\alpha_2} b_2^{(\alpha, 0)}(q^i, q^j; t) \} dq^j = \\ & = \sum_{j \neq i}^N \int_{v_j} G_{ij}^{\alpha_1} \left[\frac{\partial b_2^{(\alpha, 0)}}{\partial q_i^\alpha} + \frac{\partial b_2^{(0, \alpha)}}{\partial q_j^\alpha} \right] dq^j. \end{aligned} \quad (8)$$

Нетрудно видеть, что аналогичным образом всю систему уравнений можно свести к уравнениям относительно коэффициентов нечетного ранга.

На данном этапе полезно перейти к корреляционным добавкам β_n , которые вводятся с помощью сформулированного в [3] группового разложения. Характерной особенностью этого разложения является то, что оно содержит дваждыусловные равновесные функции распределения одинаковой «частичности» с исходной приведенной динамической функцией. Это позволяет учесть равновесные корреляции соответствующих порядков и тем самым реализовать позитивные качества равновесных функций условных распределений (см. [4]). Замыкание осуществляется путем аппроксимации старших корреляционных добавок, что

дает возможность провести эту операцию на возможно более «позднем» этапе.

Представим одночастичные $\beta_1(i; t)$ и двухчастичные $\beta_2(i, j; t)$ корреляционные добавки в виде рядов по полиномам Эрмита

$$\begin{aligned}\beta_1(i; t) &= \sum_{n=0}^{\infty} \varphi^{(\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_n)}(q^i; t) H^{(\alpha_1 \dots \alpha_n)}(p^i) F_{11}(p^i), \\ \beta_2(i, j; t) &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \psi^{(\alpha_1 \dots \alpha_n \gamma_1 \dots \gamma_m)}(q^i, q^j; t) H^{(\alpha_1 \dots \alpha_n)}(p^i) \times \\ &\quad H^{(\gamma_1 \dots \gamma_m)}(p^j) F_{11}(p^i) F_{11}(p^j).\end{aligned}\quad (9)$$

Групповое разложение [3], связывающее b_s и β_s , дает возможность получить следующие соотношения между коэффициентами разложений (1) и (9):

$$\begin{aligned}b_2^{(0,0)}(q^i, q^j; t) &= \varphi^{(0)}(q^i; t) + \varphi^{(0)}(q^j; t) + \psi^{(0,0)}(q^i, q^j; t), \\ b_2^{(\alpha_1 \dots \alpha_n; 0)}(q^i, q^j; t) &= \varphi^{(\alpha_1 \dots \alpha_n)}(q^i; t) + \psi^{(\alpha_1 \dots \alpha_n; 0)}(q^i, q^j; t), \\ b_2^{(\alpha_1 \dots \alpha_n; \beta_1 \dots \beta_m)}(q^i, q^j; t) &= \psi^{(\alpha_1 \dots \alpha_n; \beta_1 \dots \beta_m)}(q^i, q^j; t),\end{aligned}\quad (10)$$

В коэффициенты функций b_s входят коэффициенты младших функций β_{s-k} ($k \geq 1$) только в том случае, если среди индексов коэффициентов функций b_s имеются нулевые.

Из условия нормировки приведенных динамических функций

$$b_1(q^i, p^i; t) = \int_{v_j} \int_{\Omega_p} b_2(q^i, p^i, q^j, p^j; t) dq^j dp^j, \quad (11)$$

учитывая (9) и (10), можно получить условия нормировки коэффициентов φ и ψ :

$$\int_{v_j} [\varphi^{(0)}(q^j; t) + \psi^{(0,0)}(q^i, q^j; t)] F_{11}^{(1)}(q^i, q^j) dq^j = 0, \quad (12)$$

$$\int_{v_j} \psi^{(\alpha_1 \dots \alpha_n; 0)}(q^i, q^j; t) F_{11}^{(1)}(q^i, q^j) dq^j = 0, \quad (13)$$

где $F_{11}^{(1)}(q^i, q^j)$ — конфигурационная часть равновесной двухчастичной функции условных распределений [4].

С целью понижения размерности задачи произведем редукцию от уравнения в частных производных (8) к системе обыкновенных дифференциальных уравнений. Для этого разложим φ и ψ в конфигурационном пространстве в ряд по специальным ортогональным полиномам, используя конфигурационную часть одночастичной равновесной функции условных распределений, как приводящую функцию. При разложении $\varphi^{(\alpha)}$ и $\psi^{(\alpha, 0)}$ ограничимся следующими членами:

$$\begin{aligned}\varphi^{(\alpha)}(q^i; t) &= [\varphi_{(0)}^{(\alpha)}(i; t) + Q_{(\gamma)}(q^i) \varphi_{(\gamma)}^{(\alpha)}(i; t) + \\ &\quad + Q_{(\gamma_0)}(q^i) \varphi_{(\gamma_0)}^{(\alpha)}(i; t) + \dots] F_{11}(q^i),\end{aligned}\quad (14)$$

$$\begin{aligned}\psi^{(\alpha, 0)}(q^i, q^j; t) &= [\psi_{(0,0)}^{(\alpha, 0)}(i, j; t) + \psi_{(\gamma, 0)}^{(\alpha, 0)} Q_{(\gamma)}(q^i) + \\ &\quad + \psi_{(0, \gamma)}^{(\alpha, 0)} Q_{(\gamma)}(q^j) + \dots] F_{11}^{(1)}(q^i, q^j).\end{aligned}\quad (15)$$

Здесь коэффициенты φ и ψ зависят только от номеров ячеек и времени, но не от координат или импульсов частиц. Первые полиномы $Q_{(n)}(q)$ имеют вид:

$$Q_{(0)}(q) = 1, \quad Q_{(1)}(q) = \frac{q}{\sigma}, \quad Q_{(2)}(q) = \frac{qq}{\sigma^2} - \hat{E}, \quad (16)$$

где $\sigma^2 = \frac{1}{3} \langle q^2 \rangle$, $\langle q^2 \rangle$ — средний квадрат смещения частицы из равновесного положения; $\hat{E}$ — единичный тензор.

Проинтегрировав (8) по q^i с учетом (14) и условия ортонормированности полиномов (16), имеем

$$\ddot{\varphi}_{(0)}^{(\alpha_1)}(i; t) = - \sum_{j \neq i}^N \int \int_{v_i v_j} [G_{ij}^{\alpha\alpha_1} b_2^{(\alpha,0)}(i, j; t) - G_{ij}^{\alpha\alpha_1} b_2^{(0,\alpha)}(i, j; t)] dq^i dq^j, \quad (17)$$

где

$$G_{ij}^{\alpha\alpha_1} \equiv \frac{\partial G_{ij}^{\alpha_1}}{\partial q_i^\alpha}. \quad (18)$$

Используя (10), перепишем уравнение для $\varphi_{(0)}^{(\alpha_1)}$ в виде

$$\ddot{\varphi}_{(0)}^{(\alpha_1)}(i; t) = - \sum_{j \neq i}^N \langle G_{ij}^{\alpha\alpha_1} [\varphi^{(\alpha)}(q^i; t) - \varphi^{(\alpha)}(q^j; t) + \psi^{(\alpha,0)}(q^i, q^j; t) - \psi^{(0,\alpha)}(q^i, q^j; t)] \rangle. \quad (19)$$

Угловые скобки в (19) и в дальнейшем будут означать усреднение с помощью равновесных функций условных распределений.

Разложив $\varphi^{(\alpha)}$, $\psi^{(\alpha,0)}$, $\psi^{(0,\alpha)}$ в ряды (14), (15) и приняв во внимание, что из условия нормировки (13)

$$\psi_{(\beta,0)}^{(\alpha,0)} = 0, \quad \psi_{(0,0)}^{(\alpha,0)} = 0, \quad (20)$$

получим окончательное уравнение для $\varphi_{(0)}^{(\alpha_1)}$

$$\begin{aligned} \ddot{\varphi}_{(0)}^{(\alpha_1)}(i; t) + \sum_{j \neq i}^N \langle G_{ij}^{\alpha\alpha_1} \rangle \varphi_{(0)}^{(\alpha)}(i; t) &= \sum_{j \neq i}^N \langle G_{ij}^{\alpha\alpha_1} \rangle \varphi_{(0)}^{(\alpha)}(j; t) + \\ + \frac{1}{\sigma} \sum_{j \neq i}^N \langle G_{ij}^{\alpha\alpha_1} q_i^\beta \rangle \varphi_{(\beta)}^{(\alpha)}(j; t) - \sum_{j \neq i}^N \langle G_{ij}^{\alpha\alpha_1} \left(\frac{q_i^\beta q_i^\gamma}{\sigma^2} - \delta_{\beta\gamma} \right) \rangle \varphi_{(\beta\gamma)}^{(\alpha)}(i; t) + \\ + \sum_{j \neq i}^N \langle G_{ij}^{\alpha\alpha_1} \left(\frac{q_i^\beta q_i^\gamma}{\sigma^2} - \delta_{\beta\gamma} \right) \rangle \varphi_{(\beta\gamma)}^{(\alpha)}(j; t) + \\ + \frac{1}{\sigma} \sum_{j \neq i}^N \langle G_{ij}^{\alpha\alpha_1} q_i^\beta \rangle [\psi_{(\beta,0)}^{(0,\alpha)}(i, j; t) + \psi_{(0,\beta)}^{(\alpha,0)}(i, j; t)]. \end{aligned} \quad (21)$$

При получении уравнения для $\varphi_{(\beta)}^{(\alpha_1)}$ необходимо умножить (8) на $H^{(\beta)}(q^i)$ и проинтегрировать по q^i . Учитывая (10) и подставляя разложения (14), (15), находим

$$\ddot{\varphi}_{(\beta)}^{(\alpha_1)}(i; t) + \frac{1}{\sigma^2} \sum_{j \neq i}^N \langle G_{ij}^{\beta\alpha_1} q_i^\gamma \rangle \delta_{\alpha_1\beta} + 2 \langle G_{ij}^{\alpha_1\beta} q_i^\gamma \rangle \delta_{\alpha\beta} +$$

$$\begin{aligned}
& + \langle G_{ij}^{\alpha, \delta} q_i^\beta q_j^\gamma \rangle | \varphi_{(\gamma)}^{(\delta)}(i; t) - \frac{1}{\sigma^2} \sum_{j \neq i}^N \langle G_{ij}^{\alpha, \delta} q_i^\beta q_j^\gamma \rangle \varphi_{(\gamma)}^{(\delta)}(j; t) - \\
& - \frac{1}{\sigma} \sum_{j \neq i}^N \langle G_{ij}^{\alpha, \delta} q_i^\beta \rangle \varphi_{(0)}^{(\delta)}(j; t) + \frac{1}{\sigma} \sum_{j \neq i}^N \left[\langle G_{ij}^\beta \left(\frac{q_i^\gamma q_i^\xi}{\sigma^2} - \right. \right. \\
& \left. \left. - \delta_{\gamma\xi} \right) \rangle \delta_{\alpha, \delta} + 2 \langle G_{ij}^{\alpha, \delta} \left(\frac{q_i^\beta q_i^\xi}{\sigma^2} - \delta_{\gamma\xi} \right) \rangle \delta_{\beta\delta} + \right. \\
& \left. + \langle G_{ij}^{\alpha, \delta} q_i^\beta \left(\frac{q_i^\gamma q_i^\xi}{\sigma^2} - \delta_{\gamma\xi} \right) \rangle \right] \varphi_{(\gamma\xi)}^{(\delta)}(i; t) - \\
& - \frac{1}{\sigma} \sum_{j \neq i}^N \langle G_{ij}^{\alpha, \delta} q_i^\beta \left(\frac{q_i^\gamma q_i^\xi}{\sigma^2} - \delta_{\gamma\xi} \right) \rangle \varphi_{(\gamma\xi)}^{(\delta)}(j; t) + \\
& + \frac{1}{\sigma^2} \sum_{j \neq i}^N [\langle G_{ij}^\beta q_j^\gamma \rangle \delta_{\alpha, \delta} + 2 \langle G_{ij}^{\alpha, \delta} q_j^\gamma \rangle \delta_{\beta\delta} + \langle G_{ij}^{\alpha, \delta} q_i^\beta q_j^\gamma \rangle | \psi_{(0, \gamma)}^{(\delta, 0)}(i, j; t) - \\
& - \frac{1}{\sigma^2} \sum_{j \neq i}^N \langle G_{ij}^{\alpha, \delta} q_i^\beta q_j^\gamma \rangle \psi_{(\gamma, 0)}^{(0, \delta)}(i, j; t)] = 0. \quad (22)
\end{aligned}$$

Уравнения для $\varphi_{(\beta\gamma)}^{(\alpha)}$ получаются аналогично (21) и (22), с той лишь разницей, что (8) умножается перед интегрированием по q^i на $H^{(\beta\gamma)}(q^i)$. Они имеют вид

$$\begin{aligned}
& \varphi_{(\beta\gamma)}^{(\alpha)}(i; t) - \frac{\theta}{\sigma^2} [\varphi_{(0)}^{(\beta)} \delta_{\alpha\gamma} + \varphi_{(0)}^{(\alpha)} \delta_{\alpha\beta} + \varphi_{(0)}^{(\alpha)} \delta_{\beta\gamma} + 6\varphi_{(0)}^{(\alpha\beta\gamma)}] + \\
& + \frac{1}{\sigma^3} \sum_{j \neq i}^N [\langle G_{ij}^\gamma q_i^\beta q_j^\delta \rangle \psi_{(0, \delta)}^{(\alpha, 0)}(i, j; t) + \langle G_{ij}^{\alpha} q_i^\beta q_j^\delta \rangle \psi_{(\delta, \delta)}^{(\gamma, 0)}(i, j; t) + \\
& + \langle G_{ij}^{\alpha} q_i^\beta q_j^\delta \rangle \psi_{(0, \delta)}^{(\gamma, 0)}(i, j; t)] + \frac{1}{\sigma} \sum_{j \neq i}^N \left[\left\langle \left(\frac{q_i^\beta q_i^\gamma}{\sigma^2} - \right. \right. \right. \\
& \left. \left. - \delta_{\beta\gamma} \right) G_{ij}^{\alpha, \delta} q_j^\delta \right\rangle \psi_{(\delta, \delta)}^{(\xi, 0)}(i, j; t) + \\
& \left. + \left\langle \left(\frac{q_i^\beta q_i^\gamma}{\sigma^2} - \delta_{\beta\gamma} \right) G_{ij}^{\alpha, \delta} q_j^\delta \right\rangle \psi_{(\delta, \delta)}^{(0, \xi)}(i, j; t) \right] = 0. \quad (23)
\end{aligned}$$

При выводе уравнения для $\psi_{(0, \beta)}^{(\alpha, 0)}$ необходимо использовать ту же методику, что и при выводе (21). Запишем его в окончательном виде (более подробные выкладки приведены в [8]):

$$\begin{aligned}
& \psi_{(0, \beta)}^{(\alpha, 0)}(i, j; t) + \frac{1}{\sigma^2} \left\{ \langle q_i^\beta q_j^\delta \sum_{l \neq i}^N G_{il}^{\alpha\gamma} \rangle \psi_{(0, \delta)}^{(\gamma, 0)}(i, j; t) + \right. \\
& + \left[\left\langle q_i^\delta \sum_{l \neq i}^N G_{il}^{\alpha} \right\rangle \delta_{\beta\gamma} - \langle G_{il}^{\alpha\gamma} q_i^\delta q_j^\beta \rangle | \psi_{(0, \delta)}^{(\gamma, 0)}(j, i; t) \right] = \\
& - \frac{1}{\sigma^2} \sum_{l \neq i, j}^N \{ [\langle G_{il}^\beta q_i^\delta \rangle \delta_{\alpha\gamma} + \langle G_{il}^{\alpha\gamma} q_i^\delta q_j^\beta \rangle | \psi_{(0, \delta)}^{(\gamma, 0)}(i, l; t) - \\
& - \langle G_{il}^{\alpha\gamma} q_i^\delta q_j^\beta \rangle \psi_{(0, \delta)}^{(\gamma, 0)}(l, i; t) + 2 \langle G_{il}^{\alpha} q_i^\gamma \rangle \psi_{(0, \gamma)}^{(\beta, 0)}(j, l; t) -
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \langle G_{il}^{\alpha\gamma} q_j^\delta q_j^\beta \rangle \psi_{(0,\delta)}^{(\gamma,0)}(l, j; t) \} - \frac{1}{\sigma} \left[\langle q_j^\beta \sum_{l \neq i}^N G_{il}^{\alpha\gamma} \rangle \varphi_{(0)}^{(\gamma)}(i; t) - \right. \\
& - \langle G_{ij}^{\alpha\gamma} q_j^\beta \rangle \varphi_{(0)}^{(\gamma)}(j; t) + \sum_{l \neq i, j}^N \langle G_{il}^{\alpha\gamma} q_j^\beta \rangle \varphi_{(0)}^{(\gamma)}(l; t) \left. \right] - \\
& - \frac{1}{\sigma^2} \left\{ \langle q_i^\delta q_j^\beta \sum_{l \neq i}^N G_{il}^{\alpha\gamma} \rangle \varphi_{(\beta)}^{(\gamma)}(i; t) + \left[\langle q_j^\delta \sum_{l \neq i}^N G_{il}^{\alpha\gamma} \rangle \delta_{\beta\gamma} - \right. \right. \\
& \left. \left. - \langle G_{ij}^{\alpha\gamma} q_j^\beta q_i^\delta \rangle \right] \varphi_{(\delta)}^{(\gamma)}(j; t) + \sum_{l \neq i, j}^N \langle G_{il}^{\alpha\gamma} q_j^\beta q_l^\delta \rangle \varphi_{(\beta)}^{(\gamma)}(l; t) \right\}. \quad (24)
\end{aligned}$$

Так как функции $\psi_{(0,\beta)}^{(\alpha,0)}(i, j; t)$ и $\psi_{(\beta,0)}^{(0,\alpha)}(i, j; t)$ связаны между собой соотношением

$$\psi_{(0,\beta)}^{(\alpha,0)}(i, j; t) = \psi_{(\beta,0)}^{(0,\alpha)}(j, i; t), \quad (25)$$

то достаточно вычислить одну из них. Если в (14), (15) ограничиться записанными слагаемыми, то получаемые в результате уравнения (21) — (24) образуют замкнутую систему обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка, после решения которой можно определить временную зависимость $\varphi_{(0)}^{(\alpha)}$ или, что адекватно, корреляционную функцию импульса с учетом старших полиномов.

Отметим, что при выводе основных уравнений [6] в первом порядке по ортогональным полиномам понадобились функции $\varphi_{(\alpha)}^{(0)}$, $\varphi_{(0)}^{(\alpha)}$. Во втором порядке дополнительно учитываются $\varphi_{(\beta)}^{(\alpha)}$, $\varphi_{(\alpha\beta)}^{(0)}$, $\varphi_{(0)}^{(\alpha\beta)}$, $\psi_{(0,0)}^{(\alpha,0)}$, $\psi_{(\alpha,0)}^{(0,0)}$.

Поэтому в целом процедура обрыва характеризуется неравенством

$$n + c \leq p + 1, \quad (26)$$

где n — суммарное количество значимых (ненулевых) индексов соответствующего коэффициента разложения; c — его «частичность» (φ — одночастичные, ψ — двух и т. д.); p — порядок приближения теории. Система (21) — (24) соответствует $p=3$. Первых три члена (21) соответствуют первому приближению теории, т. е. уравнению, полученному в [6]. Отметим, что уравнения в первом приближении теории формально эквивалентны системе уравнений, описывающей динамику частиц гармонического кристалла, но существенное отличие состоит в том, что в (21) входит не динамическая матрица гармонической системы, а ее

аналог, определяемый тензорами $\sum_{j \neq i}^N \langle G_{ij}^{\alpha\alpha} \rangle$. Последние вычисляются в результате статистического усреднения второй производной потенциала межчастичного взаимодействия и эффективным образом учитывают ангармонизмы всех порядков. Благодаря тому, что усреднение производится с помощью равновесной функции распределения, аналог динамической матрицы в данном случае существенно зависит, в отличие от гармонической и квазигармонической теорий, как от объема, так и от температуры системы. Функция распределения входит в аналог динамической матрицы в результате использования разложений по ортогональным полиномам, для которых она является производящей. Заметим также, что ортогональные полиномы были использованы ранее для построения теории сильно ангармонического квантового кристалла при равной нулю температуре [9], однако обобщение на отличные от нуля температуры сделано не было. Разработанный в настоящей работе подход существенно отличается от использованного в [9] как по своей идее, так и по используемой технике.

Система уравнений во втором приближении теории, в которую в соответствии с правилом (26) входят уравнение (21) для $\varphi_{(0)}^{(\alpha_1)}(i; t)$ и (22) для $\varphi_{(\beta)}^{(\alpha_1)}$, была проинтегрирована на ЭВМ ЕС-1022 с помощью разработанной в [6, 10] методики счета. На рис. 1 представлены результаты вычислений при температуре $\theta=1$ и объеме $v=0,98$ (в единицах ϵ/k_B и σ соответственно, ϵ и σ — параметры использованного потенциала Леннарда — Джонса, k_B — постоянная Больцмана) автокорреляционной функции импульсов частицы совершенного кристалла в первом (кривая 1) и втором (кривая 2) приближениях теории. К наиболее существенным различиям следует отнести уменьшение глубины перво-

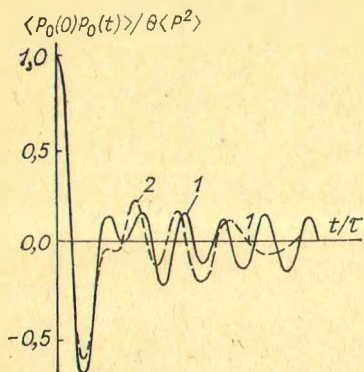


Рис. 1

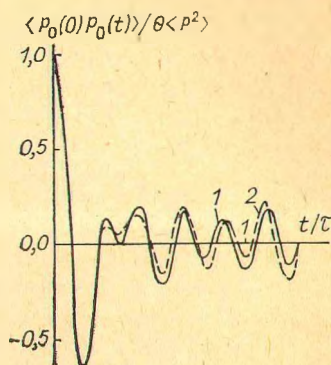


Рис. 2

го минимума, исчезновение первого положительного пика и более быстрое затухание колебаний при $t > 0,5 \tau$, что находится в соответствии с результатами вычислений по методу молекулярной динамики [11].

При переходе к состояниям кристалла, близким к гармоническому, влияние второго приближения уменьшается. Это подтверждается конкретными вычислениями при $\theta=0,3$ и $v=0,92$, результаты которых приведены на рис. 2 (кривая 1 — первое приближение, кривая 2 — второе).

При стремлении $\theta \rightarrow 0$ аналог динамической матрицы $\sum_{i=1}^N G_{ij}^{\alpha\alpha_1}$ переходит в динамическую матрицу гармонической теории.

В общем случае, анализируя структуру системы уравнений (21), (22), заметим, что вклад второго приближения, обусловленный функциями $\varphi_{(\beta)}^{(\alpha)}$, пропорционален $\langle G_{ij}^{\alpha\alpha_1} q_i^\beta \rangle$. В свою очередь, функции $\varphi_{(\beta)}^{(\alpha)}$ возбуждаются благодаря присутствию в (22) членов, содержащих $\varphi_{(0)}^{(\delta)}$, и снова коэффициенты связи пропорциональны $\langle G_{ij}^{\alpha\delta} q_i^\beta \rangle / \sigma$. Относительное влияние перекрестных эффектов должно сравниваться с влиянием самих функций $\varphi_{(0)}^{(\delta)}$ или $\varphi_{(\beta)}^{(\alpha)}$ на свое изменение, т. е. в первом случае с $\langle G_{ij}^{\alpha\alpha_1} \rangle$, а во втором — с $[\langle G_{ij}^{\beta\gamma} q_i^\gamma \rangle \delta_{\alpha,\delta} + 2 \langle G_{ij}^{\alpha\gamma} q_i^\gamma \rangle \delta_{\beta,\delta} + \langle G_{ij}^{\alpha\delta} q_i^\beta q_i^\gamma \rangle]$. Конкретные вычисления на ЭВМ показывают, что оба коэффициента ведут себя примерно одинаково и ведущими являются компоненты в направлении на ближайшего соседа i частицы. Таким образом, параметр (пусть ось OX совпадает с указанным направлением)

$$\lambda = \left(\frac{\langle G_{ij}^{xx} q_i^x \rangle}{\langle G_{ij}^{xx} \rangle \sigma} \right)^2 \quad (27)$$

может рассматриваться как качественный критерий влияния второго приближения теории. При $\theta=1$, $v=0,98$, $\lambda=0,090$ понижение температуры до $\theta=0,3$ и уменьшение объема до $v=0,92$ приводят к $\lambda=0,039$.

При дальнейшем понижении θ тенденция к уменьшению λ сохраняется. Для гармонического взаимодействия $G_{ij}^{xx} = \text{const}$ и $\lambda = 0$.

Авторы признательны профессору Л. А. Ротту за внимание к работе и обсуждение затронутых в ней вопросов.

Summary

A method to construct the elder approximations in the theory of the time correlation functions has been developed. The theory is based on the group particle decomposition of the reduced dynamic functions by partial correlations. The results of computer-aided calculations of the momentum autocorrelation functions of a molecular FCC crystal in the second approximation are analysed.

Литература

1. Либов Р. Введение в теорию кинетических уравнений.— М.: Мир, 1974.— 371 с.
2. Климонтович Ю. Л. Кинетическая теория неидеального газа и неидеальной плазмы.— М.: Наука, 1975.— 352 с.
3. Вихренко В. С., Кулак М. И.— ДАН БССР, 1980, т. 24, № 2, с. 129—132.
4. Ротт Л. А. Статистическая теория молекулярных систем.— М.: Наука, 1979.— 280 с.
5. Кулак М. И., Вихренко В. С.— Весті АН БССР. Сер. фіз.-мат. навук, 1980, № 6, с. 90—95.
6. Кулак М. И., Вихренко В. С.— Весті АН БССР. Сер. фіз.-мат. навук, 1982, № 5, с. 91—97.
7. Бейтмен Г., Эрдейи А. Высшие трансцендентные функции.— М.: Наука, 1966, т. 2.— 276 с.
8. Кулак М. И. Исследование динамических свойств молекулярных конденсированных систем на основе кинетических функций условных распределений: Автореф. канд. дис.— Мн., 1982.— 19 с.
9. Koehler T. R.— Phys. Rev. Lett., 1967, vol. 18, N 16, p. 654—656; Phys. Rev., 1968, vol. 165, N 3, p. 942—950.
10. Кулак М. И., Вихренко В. С.— В сб.: Теор. и прикл. механика. Мн.: Высшая школа, 1982, вып. 9, с. 106—112.
11. Dickey J. M., Paskin A.— Phys. Rev., 1969, vol. 188, N 3, p. 1407—1418.

Белорусский технологический
институт им. С. М. Кирова

Поступила в редакцию
17.12.82

УДК 537.226.4

М. Р. ПАСЛЯДОВІЧ, У. С. РАЧКЕВІЧ

ЭЛЕКТРАГІРАЦЫЯ НЕКАТОРЫХ АПТЫЧНА АКТЫЎНЫХ СМЕКТЫЧНЫХ ВАДКІХ КРЫШТАЛЯЎ

Параўнальна нядаўна была выяўлена і даследавана ў цвёрдых сегнетаэлектрыках залежнасць аптычнай актыўнасці ад электрычнага поля [1, 2]. Цяжкасць вывучэння гэтай з'явы заключаецца ў тым, што вялікую памылку ў гэтых вымярэнні ўносіць двайное праменепраламленне, якое ўзнікае як з прычыны дэфекта ў крышталічнай структуры, так і пры назіранні ў напрамку, які адрозніваецца ад напрамку ўздоўж аптычнай восі. Акрамя таго, велічыня ρ (E) у цвёрдых сегнетаэлектрыках невялікая і ў некаторых выпадках можа ў значнай ступені маскіравацца эфектамі двайнога праменепраламлення або электрааптычнымі эфектамі. Прасцей і ў найбольш чыстым выглядзе гэта з'ява назіраецца ў цэнтрасіметрычных крышталях малібдату свінцу, вывучаных аўтарамі [3]. У гэтых крышталях уласная (без электрычнага поля) аптычная актыўнасць адсутнічае і з'яўленне яе абумоўлена толькі дзеяннем электрычнага поля.