Краткие сообщения по физике № 8-1990 г.

УДК 536.75

РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ПЕРКУСА – ЙЕВИКА ДЛЯ ПОТЕНЦИАЛА СЮЗЕРЛЕНДА

В.И. Курочкин

Представлено аналитическое решение уравнения Перкуса – Йевика для парной функции распределения с учетом четырехчастичных корреляций включительно и в первом порядке по параметру взаимодействия.

Парная функция распределения ПФР играет фундаментальную роль в статистической механике /1/. С ее помощью можно определять уравнение состояния плотных газов и жидкостей. В последнее время появился ряд работ по кинетической теории плотных газов, в которых получены аналитические выражения для коэффициентов переноса. В эти выражения входит ПФР /2/. В связи с этим вывод аналитических выражений для ПФР представляется весьма актуальным. Для вычисления ПФР воспользуемся уравнением Перкуса – Йевика /1–2/:

$$n_2(r)\exp[\beta\varphi(r)] = 1 - n\int\left\{\exp[\beta\varphi(s)] - 1\right\} n_2(s)\,[n_2(|\mathbf{r}-\mathbf{s}|) - 1]\,ds. \tag{1}$$

Здесь $n_2(r)$ – парная функция распределения, n – плотность частиц, $\varphi(r)$ – потенциал взаимодействия, $\beta = 1/k_BT$ (k_B – постоянная Больцмана, а T – температура газа).

Пусть φ – потенциал Сюзерленда, представляющий собой сумму потенциала $\bar{\varphi}$ твердых сфер радиуса σ и "хвоста" $\tilde{\varphi}$, учитывающего мягкое взаимодействие на расстояниях $r > \sigma$:

$$\bar{\varphi} = \begin{cases} \infty, & r < \sigma \\ 0, & r \geqslant \sigma, \end{cases} \qquad \tilde{\varphi}(r) = \begin{cases} 0, & r < \sigma \\ \epsilon(\sigma/r)^k, & r \geqslant \sigma. \end{cases}$$

Введем функцию χ согласно соотношению

$$\chi(r) = n_2(r)\exp[\beta\varphi(r)]. \tag{2}$$

В случае потенциала твердых сфер в диапазоне $r < \sigma$ для ПФР получено точное решение уравнения Перкуса – Йевика /1/ и разработаны численные методы его решения /2/. Однако, поскольку ПФР кроме переменной r содержит два параметра n и T, для практического использования необходимо иметь аналитическое решение для ПФР в диапазоне $r > \sigma$. С этой целью представим прямую корреляционную функцию в виде ряда по степеням плотности и параметру взаимодействия

$$\chi = \sum_{i=0}^{\infty} (nB)^i [\bar{\chi}_i + \mu\tilde{\chi}_i], \quad \bar{\chi}_0 = 1, \quad \tilde{\chi}_0 = 0. \tag{3}$$

Здесь $B = (2\pi/3)\sigma^3$, $\mu = \epsilon/k_BT$. Подставляя разложение (3) в уравнение (1), с учетом (2) получим для определения $\bar{\chi}_i$ и $\tilde{\chi}_i$ выражения

$$x\bar{\chi}_{i+1}(x) = 6x\int_0^1 \bar{\chi}_i(s)\,s^2 ds - 3\sum_{l=0}^{i} \int \bar{\chi}_l(s)\,ds\,d\int_{|s-x|}^{s+x} \bar{\chi}_{i-l}(t)\,t\Theta(t-1)\,dt, \tag{4}$$

$$x\tilde{\chi}_{i+1}(x) = 6x\int_0^1 \tilde{\chi}_1(s)\,s^2 ds - 6x\int_0^1 \bar{\chi}_i(s)\tilde{\varphi}(s)\,s^2 ds +$$

$$+3\sum_{l=0}^{i}\Big\{\int \bar{\chi}_l(s)\,s ds \int_{|s-x|}^{s+x} \bar{\chi}_{i-l}(t)\tilde{\varphi}(t)\Theta(t-1)\,t dt -$$

$$-\int_1^{\infty} \bar{\chi}_l(s)\tilde{\varphi}(s)\,s ds\int_{|s-x|}^{s+x} \bar{\chi}_{i-l}(t)\Theta(t-1)\,t dt - \int_0^1 \tilde{\chi}_l(s)\,s ds\int_{|s-x|}^{s+x} \bar{\chi}_{i-l}(t)\Theta(t-1)\,t dt - \tag{5}$$

$$-\int_0^1 \bar{\chi}_l(s)\,s ds\int_{|s-x|}^{s+x} \tilde{\chi}_{i-l}(t)\Theta(t-1)\,t dt\Big\},$$

где $x = r/\sigma$, $\Theta(t)$ – ступенчатая функция Хэвисайда.

Полагая $\bar{\chi}_0 = 1$, $\tilde{\chi}_0 = 0$, получим из (4) и (5):

$$\bar{\chi}_1(x) = \begin{cases} 2 - 3x/2 + x^3/8, & 0 \leqslant x \leqslant 2 \\ 0, & x > 2, \end{cases}$$

$$\tilde{\chi}_1(x) = \begin{cases} f(x, 1+x, k) - f(x, 1, k), & 0 \leqslant x \leqslant 2 \\ f(x, 1+x, k) - f(x, x-1, k), & x > 2, \end{cases}$$

где $f(x, y, k) = 3\left\{\left(x - \dfrac{1}{x}\right)\dfrac{y^{2-k}}{k-2} - \dfrac{2y^{3-k}}{k-3} + \dfrac{y^{4-k}}{x(4-k)}\right\}$,

$$\tilde{\chi}_2(x) = \begin{cases} (1/8)(15 - 15x + 2x^3), & 0 \leqslant x \leqslant 1, \\ (1/560)(x^6 - 63x^4 + 210x^3 + 315x^2 - 180x + 1645 - 162x^{-1}), & 1 \leqslant x \leqslant 2, \\ (1/560)(x^6 - 63x^4 + 210x^3 + 315x^2 - 2268x + 2835 - 466x^{-1}), & 2 \leqslant x \leqslant 3, \\ 0, \ x > 3. \end{cases}$$

Подставляя $\bar{\chi}_2$ и $\tilde{\chi}_1$ в уравнение (5), можно получить выражение для $\tilde{\chi}_2$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Б а л е с к у Р. Равновесная и неравновесная статистическая механика. М., Мир, 1978.
2. К р о к с т о н К. Физика жидкого состояния. М., Мир, 1978.

Поступила в редакцию 12 марта 1990 г.