Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

С. В. Темко, О состоянии ограниченного скопления многих частиц, *ТМФ*, 1996, том 109, номер 2, 270–278

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf1226>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 34.227.88.159

26 апреля 2023 г., 11:10:08

С. В. Темко*

О СОСТОЯНИИ ОГРАНИЧЕННОГО СКОПЛЕНИЯ МНОГИХ ЧАСТИЦ

Получены уравнение состояния и выражение для энергии пространственно-ограниченного скопления многих частиц со степенным взаимодействием между частицами в квазиклассическом представлении для состояния вырождения. Взаимодействие частиц с поверхностью скопления учитывается простейшим образом.

1. ВВЕДЕНИЕ

Для построения уравнения состояния и подсчета энергии пространственно-ограниченного скопления многих частиц необходимы функции распределения статистической механики. Известно [1], что для получения уравнения состояния и вычисления энергии особо важное значение имеют бинарные функции распределения. В качестве уравнения состояния для неидеального скопления можно принять уравнение состояния для идеального газа [2]. Однако этого приближения недостаточно для ограниченного скопления из-за пренебрежения влиянием пространственной ограниченности и геометрической формы скопления на его физические и физико-химические свойства. Кроме того, уравнение состояния идеального газа не учитывает влияние корреляций, обусловленных взаимодействием между частицами и поверхностью скопления. Скопление предполагаем настолько разреженным, что парные взаимодействия более вероятны, чем тройные, четверные взаимодействия и т. д.

Взаимодействия между частицами описываем потенциальными функциями. Взаимодействие частиц с поверхностью скопления учитываем простейшим образом [3]. Предполагаем, что благодаря совместному действию внешних, внутренних и поверхностных сил только очень малое число частиц может покинуть скопление через его поверхность и оказаться во внешней среде. Поэтому вне скопления его частицы практически отсутствуют.

Нами построено уравнение состояния и найдена энергия для пространственно-ограниченного скопления с учетом корреляции в предположении, что скопление находится в вырожденном состоянии. Для примера рассматриваем скопление со степенным взаимодействием между частицами. Такое описание взаимодействия между частицами представляет интерес для полимерных цепочек. Для конкретности предполагаем, что скопление имеет форму шара с центром в начале координат. Взаимодействие частиц с поверхностью скопления учитываем простейшим образом. В указанном приближении

* Академия коммерции и управления

получены уравнение состояния, химические потенциалы и энергии компонент, а также энергия всего скопления.

2. ПОСТАНОВКА ПРОБЛЕМЫ

Рассматриваем пространственно-ограниченное скопление многих частиц, состоящее из частиц M компонент ($M \geq 1$). Компонента – это совокупность частиц, одинаковых по физическим и химическим свойствам. Мы отказываемся от подробного описания поведения отдельной частицы в малых объемах и рассматриваем частицы в виде “сплошных размытых пятен”, описывая их распределениями. Это предположение соответствует представлению механики сплошных сред и отвечает предположению о “размытости” поверхности отдельной частицы. Плотность распределения точек границы частицы среды принимаем в форме распределения $C_\gamma \exp(-\gamma/r^2)$, где $0 < \gamma \ll 1$. Параметр γ является геометрическим параметром, который находим при решении самосогласованной проблемы. Введенное предположение о свойствах поверхности отдельной частицы среды отвечает методу регуляризации. Распределение понимаем в смысле Соболева–Шварца [4].

Скопление рассматриваем в состоянии квазистатического равновесия. Последнее не ограничивает общности рассмотрения проблемы, т.к. быстро протекающие во времени процессы имеют малые импульсы и должен пройти достаточно большой промежуток времени, прежде чем они смогут вызвать заметные изменения состояния скопления.

Ограниченное скопление рассматриваем в квазиклассическом представлении.

Состояние скопления описываем вектор-плотностью распределения частиц

$$\chi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\alpha}) = (\chi_1(\mathbf{r}, \boldsymbol{\alpha}), \chi_2(\mathbf{r}, \boldsymbol{\alpha}), \dots, \chi_M(\mathbf{r}, \boldsymbol{\alpha})),$$

где $\mathbf{r}$ – точка, расположенная в объеме данного скопления, $\mathbf{r} \in D$; D – область трехмерного пространства, заполненная частицами рассматриваемого скопления. Предполагаем, что граница δD области D совпадает с поверхностью скопления. Через $\boldsymbol{\alpha}$ обозначаем набор числовых параметров для данного скопления. Набор числовых параметров $\boldsymbol{\alpha}$ образуется числовыми параметрами α_j , где $j = \overline{1, l}$; l – количество числовых параметров, характерных для данного скопления. Набор числовых параметров $\boldsymbol{\alpha}$ образуется числовыми параметрами потенциальных функций, размерами скопления, параметрами сторонних полей и параметром γ . Числовые параметры α_j , $j = \overline{1, l}$, подразделяем на внешние и внутренние термодинамические параметры. Все числовые параметры α_j изменяются в некоторых интервалах $\alpha'_j \leq \alpha_j \leq \alpha''_j$, где $j = \overline{1, l}$. Первоначально границы интервалов α'_j и α''_j устанавливаем гипотетически. Окончательные значения границ α'_j и α''_j , $j = \overline{1, l}$, определяем при решении самосогласованной проблемы. Совокупность ограничений $\alpha'_j \leq \alpha_j \leq \alpha''_j$, $j = \overline{1, l}$, образует область $\Omega(\boldsymbol{\alpha})$ возможных изменений вектора $\boldsymbol{\alpha}$.

Числовые параметры α_j , $j = \overline{1, l}$, подразделяем на свободные и связанные. Числовые параметры называем свободными, если они изменяются независимо друг от друга, и связанными, если они выражаются через свободные с помощью известных соотношений, которые вводим по результатам анализа физической и физико-химической природы данного ограниченного скопления. Здесь рассматриваем только свободные числовые параметры скопления.

Для нахождения вектор-плотности распределения частиц $\chi = \chi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\alpha})$, где $\mathbf{r} \in D$, $\boldsymbol{\alpha} \in \Omega(\boldsymbol{\alpha})$, описывающей состояние данного скопления, решаем проблему равновесия для исследуемого пространственно-ограниченного скопления. Впервые методы решения общей проблемы равновесия были предложены автором совместно с К.В. Темко и С.К. Кузьминым [3, 5–8].

3. ОГРАНИЧЕННОЕ СКОПЛЕНИЕ СО СТЕПЕННЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

Для примера рассматриваем ограниченное скопление со степенным взаимодействием между частицами. Предполагаем, что скопление имеет форму шара радиуса R с центром в начале координат.

Потенциальные функции степенного взаимодействия между частицами записываем в виде

$$\varphi_{ab}(r) = C_{ab}/r^{n-\beta},$$

где C_{ab} – числовые параметры потенциальных функций $\varphi_{ab}(r)$, образующие симметричную и положительно-определенную матрицу (C_{ab}) , $a, b = \overline{1, M}$; n – размерность пространства координат; β – показатель степени для степенного взаимодействия, $0 < \beta < 2$.

Пусть $M = 2$ и $n = 3$. В работе [3] получена вектор-плотность распределения частиц для ограниченного скопления со степенным взаимодействием между частицами

$$\chi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\alpha}) = A(\beta) \binom{n_1}{n_2} \frac{(R^2 - r^2)^{-\beta/2}}{R^{n-\beta}} \theta(R - r),$$

здесь

$$A(\beta) = \Gamma\left(\frac{\beta}{2}\right) \Gamma\left(\frac{5-\beta}{2}\right) 2^{1-\beta/2} / \pi,$$

$$\theta(R - r) = \begin{cases} 1 & \text{при } 0 \leq r < R_p, \\ 0 & \text{при } -\infty < r < R_1 \text{ и } R_1 \leq R_p < r < +\infty, \end{cases}$$

$n_1 + n_2 = 1$, $\frac{n'_a}{n_a} \leq n_a \leq \frac{n''_a}{n_a}$; n'_a, n''_a – граничные значения для средних концентраций n_a , $a = \overline{1, M}$; R_1 – нижняя граница изменений радиуса R шара с центром в начале координат.

Средние плотности $\bar{\chi}_a(\mathbf{r})$ компонент находим по формуле

$$\bar{\chi}_a(\mathbf{r}) = \frac{A(\beta)}{2-\beta} \frac{\bar{n}_a}{r^2 R_p} \left(1 - \frac{r^2}{R_p^2}\right)^{1-\frac{\beta}{2}},$$

здесь

$$\bar{n}_a = \frac{n'_a + n''_a}{2}, \quad a = \overline{1, M}.$$

Средние значения квадратов плотности $\overline{\chi_a^2(\mathbf{r}, \boldsymbol{\alpha})}$ находим по формуле

$$\overline{\chi_a^2(\mathbf{r}, \boldsymbol{\alpha})} = \frac{2}{3} \frac{(A(\beta))^2}{1-\beta} (\overline{n_a'^2} + \overline{n'_a n''_a} + \overline{n_a''^2}) \left(1 - \frac{r^2}{R_p^2}\right)^{1-\beta} \times$$

$$\times {}_2F_1\left(-\frac{3}{2}, 1-\beta; 2-\beta; 1 - \frac{r^2}{R_p^2}\right) / (r^5 R_p),$$

где $a = \overline{1, M}$.

Начальные смешанные моменты второго порядка $\overline{\chi_a(\mathbf{r}, \boldsymbol{\alpha})\chi_b(\mathbf{r}, \boldsymbol{\alpha})}$ получаем по формуле

$$\begin{aligned} \overline{\chi_a(\mathbf{r}, \boldsymbol{\alpha})\chi_b(\mathbf{r}, \boldsymbol{\alpha})} &= \frac{(A(\beta))^2}{1-\beta} \left(\bar{n}_a - \frac{2}{3}(\overline{n_a'^2} + \overline{n_a' n_a''} + \overline{n_a''^2}) \right) \left(1 - \frac{r^2}{R_p^2} \right)^{1-\beta} \times \\ &\times {}_2F_1 \left(-\frac{3}{2}, 1-\beta; 2-\beta; 1 - \frac{r^2}{R_p^2} \right) / (r^5 R_p), \end{aligned}$$

где $a \neq b = \overline{1, M}$.

Для нахождения элементов $\sigma_{ab}(r)$ матрицы ковариации $\sigma(r)$, которые являются вторыми центральными моментами случайной вектор-плотности распределения частиц [8], имеем

$$\begin{aligned} \sigma_{aa}(r) &= \overline{\chi_a^2(\mathbf{r}, \boldsymbol{\alpha})} - (\bar{\chi}_a(r))^2, \\ \sigma_{ab}(r) &= \overline{\chi_a(\mathbf{r}, \boldsymbol{\alpha})\chi_b(\mathbf{r}, \boldsymbol{\alpha})} - \bar{\chi}_a(r)\bar{\chi}_b(r). \end{aligned}$$

Так как матрица ковариации $\sigma(r)$ – симметричная и положительно-определенная матрица, ее собственные значения $\lambda_1(r)$ и $\lambda_2(r)$ положительны, т.е. $\lambda_1 > 0$ и $\lambda_2 > 0$, где

$$\begin{aligned} \lambda_1(r) &= \frac{1}{2} \left(\sigma_{11}(r) + \sigma_{22}(r) + \sqrt{(\sigma_{11}(r) - \sigma_{22}(r))^2 + 4\sigma_{12}^2(r)} \right), \\ \lambda_2(r) &= \frac{1}{2} \left(\sigma_{11}(r) + \sigma_{22}(r) - \sqrt{(\sigma_{11}(r) - \sigma_{22}(r))^2 + 4\sigma_{12}^2(r)} \right). \end{aligned}$$

Находим элементы $t_{ab}(r)$ матрицы $T(r)$ ортогональных преобразований

$$\begin{aligned} t_{11}(r) &= -\sigma_{12}(r)/D_1(r), & t_{12}(r) &= (\sigma_{11}(r) - \lambda_1(r))/D_1(r), \\ t_{21}(r) &= -\sigma_{12}(r)/D_2(r), & t_{22}(r) &= (\sigma_{11}(r) - \lambda_2(r))/D_2(r), \end{aligned}$$

где

$$D_1(r) = \sqrt{\sigma_{12}^2(r) + (\sigma_{11}(r) - \lambda_1(r))^2}, \quad D_2(r) = \sqrt{\sigma_{12}^2(r) + (\sigma_{11}(r) - \lambda_2(r))^2}.$$

4. ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЧАСТИЦ ОГРАНИЧЕННОГО СКОПЛЕНИЯ СО СТЕПЕННЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

С помощью элементов $\sigma_{ab}(r)$ матрицы ковариации $\sigma(r)$ и выражений для средних $\bar{\chi}_a(r)$, $a, b = \overline{1, M}$, получаем функции распределения частиц в ограниченном скоплении [9, 10].

Находим одночастичные функции распределения [3, 8–10]

$$F_a(r_j) \simeq \bar{A}_a(r_j),$$

где

$$\begin{aligned}\bar{A}_a(r_j) &= t_{aa}(r_j)\bar{\chi}_a(r_j) + t_{ab}(r_j)\bar{\chi}_b(r_j), \\ \bar{A}_b(r_j) &= t_{ba}(r_j)\bar{\chi}_a(r_j) + t_{bb}(r_j)\bar{\chi}_b(r_j),\end{aligned}$$

$a, b = \overline{1, M}; j = 1, 2$.

Бинарные корреляционные функции $F_{ab}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ записываем в виде [9, 10]

$$F_{ab}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = F_a(\mathbf{r}_1)F_b(\mathbf{r}_2) + \varepsilon^2 g_{ab}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2),$$

где $g_{ab}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ – бинарные функции корреляционного отклонения [1], ε – малый параметр, $0 < \varepsilon \ll 1$.

Потенциальные функции $\varphi_{ab}(r)$, описывающие взаимодействие между частицами, и построенные на их основе функции корреляционного отклонения $g_{ab}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ (см. [10]) зависят от взаимного расстояния между частицами $r = |\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|$, т.е. $\varphi_{ab}(r) = \varphi_{ab}(|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|)$ и $g_{ab}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = g_{ab}(|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|)$.

5. УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ МАЛОЙ СИСТЕМЫ СО СТЕПЕННЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

Для построения уравнения состояния ограниченного скопления – малой системы – нужно сначала найти свободную энергию скопления $\mathcal{F}$.

Переходим к квазиклассическому представлению и рассматриваем ограниченное скопление в состоянии вырождения при нулевой температуре. В состоянии вырождения энергия зависит не от температуры, а от плотности, равной $1/v$, где v – удельный объем. Согласно [2] граничная энергия каждой компоненты определяется по формуле

$$\Theta_a = \left(\frac{6\pi^2 n_a}{g_a v} \right)^{2/3} \frac{\hbar^2}{2m_a},$$

где $g_a = 2S_a + 1$; m_a, S_a – соответственно масса и спин частицы компоненты a , $a = \overline{1, M}$; $\hbar$ – постоянная Планка. Для электронов спин $s_e = 1/2$ и $g_e = 2$. Граничная энергия скопления Θ выражается через граничные энергии компонент

$$\Theta = \sum_{(1 \leq a \leq M)} n_a \Theta_a. \quad (1)$$

С помощью функций распределения $F_{ab}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ вычисляем конфигурационный интеграл Q_N , который записываем в виде

$$Q_N = (C_1 + \varepsilon^2 C_2)/v^2,$$

где введены обозначения

$$\begin{aligned}C_1 &= \frac{16}{9} \pi^2 \sum_{(1 \leq a, b \leq M)} n_a n_b \frac{(A(\beta))^2}{(2 - \beta^2)} \int_0^1 \int_0^1 (1 - \zeta^2)^{1-\beta/2} (1 - \xi^2)^{1-\beta/2} \times \\ &\quad \times (t_{aa}(\zeta)n_a + t_{ab}(\zeta)n_b)(t_{ba}(\xi)n_a + t_{bb}(\xi)n_b) d\xi d\zeta, \\ C_2 &= \frac{16}{9} \pi^2 \sum_{(1 \leq a, b \leq M)} n_a n_b \frac{(A(\beta))^2}{1 - \beta} \int_0^1 \frac{e^{-\gamma/\zeta^2}}{\zeta^3} (1 - \zeta^2)^{1-\beta} \times \\ &\quad \times \left(\eta_{ab} {}_2F_1\left(-\frac{3}{2}, 1 - \beta; 2 - \beta; 1 - \zeta^2\right) - 2 \frac{1 - \beta}{(2 - \beta)^2} \bar{n}_a \bar{n}_b (1 - \zeta^2) \right) d\zeta,\end{aligned}$$

здесь

$$\eta_{ab} = \begin{cases} \frac{2}{3}(\overline{n_a'^2} + \overline{n_a' n_a''} + \overline{n_a''^2}), & a = b, \\ \bar{n}_a - \frac{2}{3}(\overline{n_a'^2} + \overline{n_a' n_a''} + \overline{n_a''^2}), & a \neq b, \end{cases}$$

$\zeta, \xi = r/R_p$, $a, b = \overline{1, M}$. Выражение C_2 вычисляем методом регуляризации, используя введенное предположение о частицах скопления. Интеграл, входящий в выражение C_2 , при $0 < \gamma$ сходится.

Свободную энергию скопления вычисляем по формуле [2]

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}_{\text{ид}} + \Theta \ln(Q_N),$$

где $\mathcal{F}_{\text{ид}}$ – свободная энергия идеального газа.

Давление P находим по формуле

$$\Delta P = -\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial v}, \quad (2)$$

где $\Delta P = P - P_0$, P_0 – начало отсчета давления P .

После подстановки в (2) выражения для свободной энергии $\mathcal{F}$ получаем уравнение состояния для ограниченного скопления

$$\Delta P = 3\frac{\Theta}{v} + \frac{2}{3}\frac{\Theta}{v} \ln(Q_N). \quad (3)$$

Уравнение (3) устанавливает зависимость между давлением P и параметрами скопления, в частности между давлением и удельным объемом v , $v = V/N$, где N – общее число частиц в скоплении, V – объем скопления.

Исследуем зависимость давления P от удельного объема v . Пусть $v > 0$. Находим удельный объем v_0 и энергию Θ_0 , при которых $\Delta P = 0$. Заметим, что $\Delta P = 0$ при $v \rightarrow \infty$. Кроме того, $\Delta P = 0$ при $3 + (2/3) \ln(Q_N^0) = 0$, где Q_N^0 – конфигурационный интеграл при $v = v_0$. Отсюда следует, что $Q_N^0 = \exp(-4.5)$ при $v = v_0 = \exp(x_0)v(0)$, где $x_0 = 2.25$ и $v(0) = \sqrt{C_1 + \varepsilon^2 C_2}$. Энергию Θ^0 при $v = v_0$ находим по формуле (1). При $v \rightarrow 0$ давление P неограниченно возрастает.

Исследуем теперь экстремальные свойства давления P как функции удельного объема v . Из необходимого условия экстремума первая производная $\partial P / \partial v = 0$. Из равенства нулю первой производной $\partial P / \partial v$ находим $v_M = \exp(x_M)v(0)$, где $x_M = 2.85$. При $x = x_M$ конфигурационный интеграл $Q_N^M = \exp(-5.7)$. Энергию Θ^M при $v = v_M$ находим по формуле (1). При $v = v_M$ вторая производная $\partial^2 P / \partial v^2 > 0$, поэтому точка $v = v_M$ является точкой минимума давления P в зависимости от удельного объема v . Минимальное давление P_M составляет $0.983P_0$, где $P_0 = \Theta(0)/v(0)$.

При $x = x_{\Pi} = 3.45$ вторая производная $\partial^2 P / \partial v^2 = 0$. Так как при прохождении через точку $v = v_{\Pi}$ вторая производная $\partial^2 P / \partial v^2$ меняет знак, точка $v = v_{\Pi}$ является точкой перегиба давления P как функции удельного объема v . В точке $v = v_{\Pi}$ конфигурационный интеграл $Q_N^{\Pi} = \exp(-6.9)$ и $v_{\Pi} = \exp(3.45)v(0)$. Значение энергии Θ^{Π} при $v = v_{\Pi}$ находим по формуле (1). Давление P_{Π} при $v = v_{\Pi}$ составляет $0.994P_0$.

Давление P , средняя энергия Θ и удельный объем v зависят от средних концентраций n_1, n_2 и параметров β и γ .

Рис. 1. Зависимость давления P от удельного объема v для ограниченного скопления со степенным взаимодействием между частицами в состоянии вырождения в логарифмических координатах: $v_0 = 9.488v(0)$ и $P = P_0$; $v_M = 17.288v(0)$ и $P = 0.983P_0$; $v_П = 31.500v(0)$ и $P = 0.994P_0$; P_0 — начало отсчета давления P .

Плотность $\rho = 1/v$, конфигурационный интеграл Q_N и средняя энергия Θ для ограниченного скопления со степенным взаимодействием имеют показательные законы распределения. При $v = \exp(x)v(0)$ и $v(0) \neq 0$ получаем

$$\rho = e^{-x}/v(0), \quad Q_N = e^{-2x}, \quad \Theta = \Theta(0)e^{-2x/3},$$

где $x = \ln(v/v(0))$, $-\infty < x < +\infty$.

С ростом v давление P при $0 < v < v_M$ монотонно убывает. В точке $v = v_M$ давление P достигает минимального значения P_M . При дальнейшем росте удельного объема v давление P возрастает до P_0 , проходя при $v = v_П$ через точку перегиба (рис. 1).

6. ЭНЕРГИЯ ОГРАНИЧЕННОГО СКОПЛЕНИЯ СО СТЕПЕННЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

Продифференцируем свободную энергию $\mathcal{F}$ по числу частиц N_a компоненты a , $a = \overline{1, M}$. Получаем химический потенциал μ_a компоненты a скопления

$$\mu_a = \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial N_a} = \frac{1}{N} \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial n_a},$$

где $a = \overline{1, M}$.

Для степенного взаимодействия свободная энергия $\mathcal{F}$ ограниченного скопления является функцией непрерывного параметра x ($x = \ln(v/v(0))$):

$$\mathcal{F} = \frac{3}{2} \left(1 - \frac{4x}{3} \right) \exp(-2x/3) \Theta(0),$$

Рис. 2. Зависимость энергии E от удельного объема v для ограниченного скопления со степенным взаимодействием между частицами в состоянии вырождения в логарифмических координатах: $v_0 = 2.217v(0)$ и $E = E_0$; $v_M = 9.488v(0)$ и $E = 0.337E_0$; $v_П = 17.288v(0)$ и $E = 0.581E_0$; E_0 – начало отсчета энергии E .

где

$$\Theta(0) = \sum_{(1 \leq a \leq M)} n_a \Theta_a(0), \quad \Theta_a(0) = \left(\frac{6\pi^2 n_a}{g_a v(0)} \right)^{\frac{2}{3}} \frac{\hbar}{2m_a}.$$

Параметры β, γ и n_a ($a = \overline{1, M}$) – независимые параметры.

Продифференцируем свободную энергию $\mathcal{F}$ по средней концентрации n_b компоненты b , $b = \overline{1, M}$,

$$\mu_b = \frac{1}{N} \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial n_b} = \frac{3}{2N} \left(1 - \frac{4x}{3} \right) \exp(-2x/3) \frac{\partial \Theta(0)}{\partial n_b},$$

где

$$\frac{\partial \Theta(0)}{\partial n_b} = \frac{5}{3} \Theta_b(0) \alpha_b(0),$$

$$\alpha_b(0) = 1 - \frac{2}{5} \left(\frac{1}{v(0)} \frac{\partial v(0)}{\partial n_b} \right) \sum_{(1 \leq a \leq M)} n_a \left(\frac{\Theta_a(0)}{\Theta_b(0)} \right).$$

Энергия E_b компоненты b , $b = \overline{1, M}$, определяется формулой

$$E_b(x) = N \mu_b = \frac{5}{2} \left(1 - \frac{4x}{3} \right) \exp(-2x/3) \frac{\partial \Theta(0)}{\partial n_b}.$$

Энергия всего скопления равна

$$E(x) = \frac{5}{2} \left(1 - \frac{4x}{3} \right) \exp(-2x/3) \sum_{(1 \leq b \leq M)} n_b \alpha_b(0) \Theta_b(0).$$

Перенесем начало отсчета энергии в точку E_0 :

$$E_0 = \frac{5}{2} \sum_{(1 \leq b \leq M)} n_b \alpha_b(0) \Theta_b(0).$$

Исследуем энергию E как параметрическую функцию удельного объема v при $v = \exp(x)v(0)$. В точке $x = 0$ энергия $E(0)$ составляет $2E_0$. Для изучения экстремальных свойств энергии скопления E как функции удельного объема v находим параметрическую производную $\partial E / \partial v$. Так как при степенном взаимодействии $v = e^x v(0)$, то $\frac{\partial E}{\partial v} = \frac{e^{-x}}{v(0)} \frac{\partial E}{\partial x}$. Первая производная $\frac{\partial E}{\partial x} = 0$ в точке $x = x_M = 2.25$. В точке $x = x_M$ удельный объем $v_M = 9.4877v(0)$ и энергия $E(x_M) = 0.3367E_0$. Вторая производная $\frac{\partial^2 E}{\partial v^2}$ в точке $x = x_M$ (и, следовательно, $v_M = v(x_M)$) положительна. Поэтому точка $v = v_M$ ($x = x_M$) является точкой минимума энергии E . Вторая производная $\partial^2 E / \partial v^2 = 0$ при $x = x_\Pi = 2.85$ и удельном объеме $v = v_\Pi = 17.288v(0)$. Энергия E при $x = x_\Pi$ составляет $E(x_\Pi) = 0.5811E_0$ (рис. 2). В точке $v = v_\Pi$ ($x = x_\Pi$) вторая производная $\partial^2 E / \partial v^2$ меняет знак. Поэтому точка $v = v_\Pi$ является точкой перегиба энергии как функции удельного объема v .

В интервале $0 < v \leq v_0$ энергия E монотонно убывает. Ограниченное скопление со степенным взаимодействием обладает высокой плотностью и ведет себя как идеальный газ. В интервале $v_0 \leq v \leq v_\Pi$ происходит переход скопления из состояния идеального газа в состояние вырожденного слабо неидеального достаточно разреженного скопления с корреляцией. При дальнейшем увеличении удельного объема и убывании плотности при $v_\Pi \leq v < +\infty$ энергия E асимптотически приближается к значению E_0 , проходя при $v = v_\Pi$ через точку перегиба.

Представляет интерес исследование указанной проблемы для других типов взаимодействий между частицами, а также в случае ненулевой температуры.

Список литературы

- [1] *Н.Н. Боголюбов*. Проблемы динамической теории в статистической физике. М.: Гостехиздат, 1946.
- [2] *Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц*. Статистическая физика. М.: Наука, 1964.
- [3] *С.В. Темко, С.К. Кузьмин*. Дифф. уравнения. 1990. Т. 26. № 12. С. 2109–2121.
- [4] *Л. Шварц*. Математические методы для физических наук. М.: ИЛЛ, 1965.
- [5] *С.В. Темко, К.В. Темко*. Докл. АН СССР. 1966. Т. 166. № 3. С. 551–554.
- [6] *С.В. Темко*. Прикл. механика и техн. физика. 1969. № 1. С. 20–26.
- [7] *С.В. Темко, С.К. Кузьмин*. Дифф. уравнения. 1979. Т. 15. № 6. С. 1113–1120.
- [8] *С.В. Темко*. ТМФ. 1994. Т. 100. № 1. С. 75–81.
- [9] *С.В. Темко*. Вестн. Росс. ун-та дружбы народов. 1994. № 2. С. 45–48.
- [10] *С.В. Темко*. ТМФ. 1995. Т. 104. № 2. С. 330–336.

Поступила в редакцию 5.XII.1995 г.

S. V. Temko

ON THE STATE OF A BOUNDED MULTIPARTICLE CLUSTER

The state equation and the energy of a space-bounded multiparticle cluster with a power interaction between particles are obtained in the quasiclassical representation for the degeneration state. Interaction of particles with a boundary cluster surface is taken into account in the simplest way.