Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Э. А. Аринштейн, Критическая асимптотика корреляций в простой жидкости,
ТМФ, 2004, том 138, номер 1, 127–138

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf3>

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: 54.84.234.179

26 апреля 2023 г., 10:37:42

© 2004 г.

Э. А. Аринштейн*

КРИТИЧЕСКАЯ АСИМПТОТИКА КОРРЕЛЯЦИЙ В ПРОСТОЙ ЖИДКОСТИ

Рассмотрено представление полной и прямой корреляционных функций жидкости через соответствующие спектральные плотности. Анализ свойств спектральных плотностей вскрывает механизм изменения аналитических свойств фурье-образа корреляционной функции и ее асимптотики в критической области. Показано, что известные ограничения на возможные значения показателя критической асимптотики следуют из этого механизма.

Ключевые слова: спектральная плотность, прямая корреляционная функция, критическая область, соотношение Орнштейна–Зернике.

1. ВВЕДЕНИЕ

Современная теория жидкости базируется на аппарате частичных функций распределения (частичных плотностей) [1], [2]. Для простых жидкостей с центральным бинарным взаимодействием унарная плотность является константой и достаточно найти бинарную корреляционную функцию $h(r)$, называемую также радиальной, либо полной, через которую выражаются давление, сжимаемость и внутренняя энергия. Утверждение о том, что через эту функцию выражаются все термодинамические величины, часто встречающееся в литературе, на наш взгляд, неточно. Так, для определения теплоемкости требуется найти тройную и четверную корреляции, через которые выражается производная от бинарной корреляции по температуре. Для бинарной корреляционной функции предложены приближенные уравнения, такие, например, как уравнение Перкуса–Йевики (ПЙ), гиперцепное уравнение (ГПЦ) и некоторые другие. Для вывода этих уравнений используется ряд качественных соображений, при этом наряду с полной корреляционной функцией в рассмотрение вводится прямая корреляционная функция Орнштейна–Зернике (ОЦ) $C(r)$, связанная в случае пространственно-однородной системы с полной корреляционной функцией $h(r)$ соотношением [1], [2]

$$h(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = C(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) + \rho \int h(\vec{r}_1 - \vec{r}_3) C(\vec{r}_3 - \vec{r}_2) d\vec{r}_3. \quad (1)$$

*Тюменский государственный университет, Тюмень, Россия. E-mail: earin@utmn.ru

Погрешности, вносимые при переходе к отмеченным приближенным уравнениям, оценить довольно трудно. Тем не менее их решения, а также решения уравнений с некоторыми поправками находятся в качественном согласии с результатами численных расчетов в случае состояний, далеких от критического.

Соотношение ОЦ используется для анализа некоторых свойств корреляционных функций. Преобразование Фурье для функций $f(r) = \{h(r), C(r)\}$ имеет вид

$$\tilde{f}(k) = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \int_0^\infty f(r) \frac{\sin(kr)}{kr} r^2 dr. \quad (2)$$

Соотношение ОЦ для фурье-образов этих функций

$$[1 + (2\pi)^{3/2} \rho \tilde{h}(k)][1 - (2\pi)^{3/2} \rho \tilde{C}(k)] = 1 \quad (3)$$

позволяет оценить асимптотику корреляционных функций в окрестности критической точки.

Так как функция $\sin(kr)/(kr)$ является четной аналитической функцией k , то можно предположить, что этим же свойством обладают и функции $\tilde{f}(k)$ и $\tilde{C}(k)$ [2]. Воспользуемся выражением для изотермической сжимаемости

$$\frac{\rho \kappa_T}{\beta} = 1 + \rho \int h(r) d^3 r = 1 + (2\pi)^{3/2} \rho \tilde{f}(0) = [1 - (2\pi)^{3/2} \rho \tilde{C}(0)]^{-1}. \quad (4)$$

Критическая точка определяется условием $\kappa_T = \infty$. Следовательно, в критической точке $1 - \rho \int C(r) d^3 r = 1 - (2\pi)^{3/2} \rho \tilde{C}(0) = 0$, прямая корреляционная функция $C(r)$ остается “короткодействующей”, при $r \rightarrow \infty$ она убывает как $r^{-(3+\gamma)}$, $\gamma > 0$, тогда как интеграл от полной корреляционной функции расходится на бесконечности вследствие возрастания радиуса корреляций. В окрестности критической точки выражение

$$1 - \rho \int C(r) d^3 r = 1 - (2\pi)^{3/2} \rho \tilde{C}(0)$$

мало. Разлагая $\sin(kr)/(kr)$ по степеням k и используя очевидные обозначения, получим

$$1 - (2\pi)^{3/2} \rho \tilde{C}(k) \approx 1 - \rho \int C(r) d^3 r + \frac{k^2 \rho}{3!} \int C(r) r^2 d^3 r = (\xi^2 + k^2) R^2. \quad (5)$$

Отсюда следует классическая асимптотика корреляционной функции

$$h(r) \approx \frac{e^{-\xi r}}{4\pi \rho R^2 r}, \quad (6)$$

причем в критической точке $\xi = 0$ и $h(r) \sim r^{-1}$.

В то же время согласно современным представлениям [1]–[3] критическая асимптотика корреляционной функции имеет иной вид,

$$h(r) \sim e^{-\xi r} r^{-(1+\eta)}, \quad \eta > 0, \quad (7)$$

не совпадающий с (6) при $\eta \neq 0$. Хотя асимптотика (7) (и соответственно $\tilde{h}(k) \sim k^{-2+\eta}$) не противоречит соотношению ОЦ, возникает вопрос о механизме вырождения асимптотики (6) в (7) и соответствующего изменения аналитических свойств функций $\tilde{h}(k)$ и $\tilde{C}(k)$ в окрестности точки $k = 0$ в критической области. Эта проблема может быть решена путем более аккуратного анализа уравнений для корреляционных функций и анализа спектральных плотностей функций $\tilde{h}(k)$ и $\tilde{C}(k)$.

2. УРАВНЕНИЯ ДЛЯ КОРРЕЛЯЦИОННЫХ ФУНКЦИЙ, АСИМПТОТИЧЕСКИЕ ФОРМУЛЫ

Корреляционные функции удовлетворяют бесконечной системе зацепляющихся уравнений. Первое из этих уравнений – уравнение для полной бинарной корреляции – имеет вид [4], [5]

$$\begin{aligned} \ln(1 + h(1, 2)) + \beta\phi(1, 2) = \rho \int C(2, 3)h(1, 3) d(3) + \\ + \frac{\rho^2}{2} \int C_3(2, 3, 4)h(1, 3)h(1, 4) d(3, 4) + \\ + \frac{\rho^3}{3!} \int C_4(2, 3, 4, 5)h(1, 3)h(1, 4)h(1, 5) d(3, 4, 5) + \dots \end{aligned} \quad (8)$$

В этой формуле и далее цифрами $1, 2, 3, \dots$ для краткости обозначены соответствующие радиус-векторы $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots$. В формуле (8) $C(2, 3) \equiv C_2(2, 3)$ обозначает прямую корреляционную функцию ОП,

$$C_n(2, 3, \dots, n+1) = \frac{\delta^{n-2} C_2(2, 3)}{\delta\rho(4) \dots \delta\rho(n+1)}$$

– старшие прямые корреляции, они являются функциональными производными от $C(2, 3)$ по флуктуирующей унарной плотности и связаны с соответствующими полными корреляциями интегральными соотношениями

$$\begin{aligned} C_3(1, 2, 3) = \int [h_3(4, 5, 6) - h_2(4, 5)h_2(4, 6) - h_2(4, 5)h_2(5, 6) - h_2(4, 6)h_2(5, 6)] \times \\ \times \prod [\delta(i, i+3) - \rho C_2(i, i+3)] d(4, 5, 6) - \rho \int C_2(1, 4)C_2(2, 4)C_2(3, 4) d(4) \end{aligned}$$

и аналогично для C_n при $n > 3$. Уравнение (8) можно рассматривать как замкнутое уравнение для $h(r)$, если уравнения для старших корреляций разрешимы хотя бы в виде интегростепенных рядов по h_2 .

В частности, полагая $C_n = 0, n \geq 3$, получим ГПЦ-приближение, полагая

$$C_{n+1}(\{n+1\}) = (n-1)! \prod_{i=2}^{n+1} C_2(1, i),$$

получим приближение ПЙ. Установить из общих соображений точность этих приближений невозможно. Можно получить связь функций C_n с термодинамическими величинами. Дифференцируя выражение для обратной величины изотермической сжимаемости (4), получим

$$\begin{aligned} \frac{\partial^n \beta p}{\partial \rho^n} = \frac{\partial^{n-1}}{\partial \rho^{n-1}} \frac{\beta}{\rho \kappa_T} = -\rho \int \frac{\delta^{n-1} C_2(1, 2)}{\delta \rho(3) \dots \delta \rho(n+1)} d(2, \dots, n+1) - \\ - (n-1) \int \frac{\delta^{n-2} C_2(1, 2)}{\delta \rho(3) \dots \delta \rho(n)} d(2, \dots, n) = \\ = -\rho \int C_{n+1}(1, 2, \dots, n+1) d(2, \dots, n+1) - \\ - (n-1) \int C_n(1, 2, \dots, n) d(2, \dots, n). \end{aligned} \quad (9)$$

При $n = 2$ выражение (9) сводится к равенству

$$\rho \frac{\partial^2 \beta p}{\partial \rho^2} = \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \frac{\beta}{\rho \kappa_T} = 1 - \rho \int C_2(1, 2) d(2) - \left(1 + \rho^2 \int C_3(1, 2, 3) d(2, 3) \right). \quad (10)$$

При температурах выше критической существует линия закритических переходов, где обратная сжимаемость имеет минимум. Критическая точка также принадлежит этой линии, следовательно, в критической точке не только

$$1 - \rho \int C_2(1, 2) d(2) = 0,$$

но и

$$1 + \rho^2 \int C_3(1, 2, 3) d(2, 3) = 0,$$

т.е. не только функция C_2 , но и C_3 остаются быстроубывающими в критической точке и интеграл от этих функций сходится.

Разлагая логарифм в левой части уравнения (8) по степеням h_2 и используя соотношение ОЦ, приведем это уравнение к форме

$$\begin{aligned} C_2(1, 2) = & -\phi(1, 2) + \frac{1}{2} \left(h_2^2(1, 2) + \rho^2 \int C_3(2, 3, 4) h_2(1, 3) h_2(1, 4) d(3, 4) \right) - \\ & - \frac{1}{3} \left(h_2^3(1, 2) - \frac{\rho^3}{2} \int C_4(2, 3, 4, 5) \prod h_2(1, i) d(3, 4, 5,) \right) + \dots, \quad (11) \end{aligned}$$

определяющей разложение прямой корреляции ОЦ в интегростепенной ряд по h_2 . Совместно с соотношением ОЦ это уравнение определяет h_2 . Из него видно, что асимптотически, на расстояниях, где потенциал $\phi(1, 2) = 0$, функция $C_2 \sim h_2^2$, но в критической точке этот член асимптотики исчезает. Учет старших членов разложения (8) не меняет этот вывод. Действительно, в силу симметрии координат (1) и (2) и с учетом того, что две функции C_3 могут быть соединены двумя функциями h_2 , из полного разложения могут быть выделены дополнительно члены

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \left[\rho^2 \int C_3(1, 3, 4) h_2(2, 3) h_2(2, 4) d(3, 4) + \right. \\ & \left. + \rho^4 \int C_3(1, 3, 4) C_3(2, 5, 6) h_2(3, 5) h_2(4, 6) d(3, 4, 5, 6) \right]. \end{aligned}$$

Главный асимптотический член равен

$$\frac{1}{2} \left(1 + \rho^2 \int C_3(3, 4, 5) d(3, 4, 5) \right)^2 h_2^2(1, 2).$$

В критической области он имеет даже более высокий, второй порядок малости.

Отметим, что в ГПЦ-приближении указанной компенсации квадратичного члена асимптотики не происходит, в приближении ПЙ $C_2(r) = 0$ при $\phi(r) = 0$. Другими словами, оба эти приближения дают неадекватное описание критической точки. Ясно, что из

общих соображений, учитывая необходимость перегруппировки членов ряда (11), определить характер поведения функций C_n , $n > 3$, и других членов этого ряда, симметричных выписанным, довольно сложно. Тем более сложно указать условия интегрируемости этих функций, значения интегралов от них и условия обращения в нуль соответствующих членов асимптотического разложения функции C_2 . Тем не менее можно принять гипотезу, что $C_2 \sim h_2^n$, где $n > 2$ — показатель критической изотермы, не обязательно целый. В этом случае для него используется обозначение δ [1]–[3].

Асимптотика полной корреляционной функции $h(r)$ определяется некоторыми свойствами прямой корреляционной функции ОЦ. Представим полную корреляцию в виде [6], [7]

$$h(r) = a \frac{e^{-\xi r}}{\xi r} + \frac{h'(r)}{r}, \quad h' = o\left(\frac{e^{-\xi r}}{\xi}\right). \quad (12)$$

При подстановке (12) в соотношение ОЦ получаем

$$\begin{aligned} a \frac{e^{-\xi r}}{\xi r} \left(1 - 4\pi\rho \int_0^\infty C(r') \frac{\text{sh}(\xi r')}{\xi r'} r'^2 dr'\right) + \frac{h'(r)}{r} - \rho \int C(r_{13}) \frac{h'(r_{23})}{r_{23}} d(3) = \\ = C(r) - \frac{4\pi\rho a}{r} \int_r^\infty C(r') \frac{\text{sh}(\xi(r' - r))}{\xi^2} r' dr'. \end{aligned} \quad (13)$$

Главный член, содержащий $a e^{-\xi r} / (\xi r)$, исчезает, если определить ξ из уравнения

$$\begin{aligned} 1 - 4\pi\rho \int_0^\infty C(r) \frac{\text{sh}(\xi r)}{\xi r} r^2 dr = 1 - \rho \int C(1, 2) d(2) + \\ + 4\pi\rho \int_0^\infty C(r) \left(\frac{\text{sh}(\xi r)}{\xi r} - 1\right) r^2 dr = 0 \end{aligned} \quad (14)$$

(точнее, если определить ξ как решение этого уравнения с наименьшей положительной действительной частью).

Умножая уравнение (13) на $r \text{sh}(\xi r)$ и интегрируя, получим слева

$$\int_0^\infty h(r) \text{sh}(\xi r) dr \left(1 - 4\pi\rho \int_0^\infty C(r) \frac{\text{sh}(\xi r)}{\xi r} r^2 dr\right) = 0,$$

и окончательно

$$\frac{\xi^3}{4a\pi\rho} = 4\pi\rho \int_0^\infty C(r) \left(\text{ch}(\xi r) - \frac{\text{sh}(\xi r)}{\xi r}\right) r^2 dr. \quad (15)$$

Уравнения (14), (15) определяют радиус $1/\xi$ главного асимптотического члена корреляционной функции $h(r)$ и его амплитуду a . Из конечности правой части уравнения (15) следует, что эта амплитуда в критической точке обращается в нуль. Ряд свойств остающейся неклассической асимптотики можно выяснить на основе анализа спектральной плотности корреляционных функций.

3. СПЕКТРАЛЬНЫЕ ПЛОТНОСТИ, МЕХАНИЗМ ВОЗНИКНОВЕНИЯ НЕКЛАССИЧЕСКОЙ АСИМПТОТИКИ

Для исследования аналитических свойств функций $\tilde{h}(k)$ и $\tilde{C}(k)$ необходимо перейти в комплексную плоскость переменной k и наряду с фурье-преобразованием функций $h(r)$ и $C(r)$ рассмотреть их представление в виде интеграла Лапласа,

$$f(r) = \int_0^\infty \bar{f}(t) \frac{e^{-tr}}{tr} dt. \quad (16)$$

Замена функции e^{-tr} на $e^{-tr}/(tr)$ обусловлена тем, что именно последняя функция осуществляет представление группы движений трехмерного пространства [8], в частности, именно такой вид имеет асимптотика (6). Эта функция удовлетворяет теореме сложения

$$\varphi_0(t|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) = \sum (-1)^n (2n+1) P_n(\cos \theta) \varphi_n(tr_1) \psi_n(r_2), \quad (17)$$

где

$$\varphi_n(x) = x^n \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^n \frac{\operatorname{sh} x}{x}, \quad \psi_n(x) = x^n \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^n \frac{e^{-x}}{x}, \quad r_1 < r_2.$$

Представление (16) определяет особые точки фурье-образа функции $\tilde{f}(k)$,

$$\tilde{f}(k) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{2ik} \int_0^\infty \left(\frac{1}{t-ik} - \frac{1}{t+ik} \right) \bar{f}(t) \frac{dt}{t} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty \frac{\bar{f}(t) dt}{(t^2 + k^2)t}, \quad (18)$$

т.е. функция $\bar{f}(t)$ является спектральной плотностью для $\tilde{f}(k)$.

Непосредственным интегрированием, либо используя теорему сложения (17), получим

$$\int e^{-tr_{13}-t'r_{23}} \frac{d(3)}{tr_{13}t'r_{23}} = \frac{4\pi}{tt'} \frac{e^{-tr} - e^{-t'r}}{t'^2 - t^2}.$$

При подстановке в соотношение ОЦ это дает

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \frac{e^{-tr}}{tr} [\bar{h}(t) - \overline{C}(t)] dt &= 4\pi\rho \int_0^\infty \int_0^\infty \bar{h}(t') \overline{C}(t) \frac{e^{-tr} - e^{-t'r}}{(t'^2 - t^2)tt'r} dt dt' = \\ &= 4\pi\rho \int_0^\infty \frac{e^{-tr}}{tr} dt \int_0^\infty P \frac{\bar{h}(t) \overline{C}(t') + \bar{h}(t') \overline{C}(t)}{(t'^2 - t^2)t'} dt' \end{aligned} \quad (19)$$

(P – символ интеграла в смысле главного значения по Коши), откуда в силу полноты системы функций $\psi_0(x)$ на полуоси получим

$$\bar{h}(t) \left(1 - 4\pi\rho \int_0^\infty P \frac{\overline{C}(t') dt'}{(t'^2 - t^2)t'} \right) = \overline{C}(t) \left(1 + 4\pi\rho \int_0^\infty P \frac{\bar{h}(t') dt'}{(t'^2 - t^2)t'} \right). \quad (20)$$

Спектр функции $\tilde{h}(k)$ имеет пару симметричных изолированных точек $\pm i\xi$, определяющих главный асимптотический член. Разлагая $f(r)$ по степеням функции $e^{-\xi r}/(\xi r)$ и учитывая соотношения

$$\frac{e^{-2\xi r}}{r^2} = \int_{2\xi}^\infty \frac{e^{-tr}}{r} dt, \quad \frac{e^{-3\xi r}}{r^3} = \int_{3\xi}^\infty \frac{e^{-tr}}{r} (t - 3\xi) dt \quad (21)$$

(и аналогичные для более высоких степеней), приходим к выводу, что спектр функций $\tilde{h}(k)$ и $\tilde{C}(k)$ кроме изолированных точек содержит на мнимой оси кусочно-гладкие (с шагом порядка ξ) части, начинающиеся с точек $\pm 2i\xi$ (в общем случае – с точек $\pm ni\xi$).

В критической области изолированный полюс спектральной плотности функции h исчезает в соответствии с уравнением (15). Остается непрерывный спектр, начинающийся почти с нуля и практически гладкий, что приводит к изменению аналитического характера этой функции, так как начало спектра является не полюсом, а точкой ветвления. Новый характер поведения функции h охватывает область $r_0 \ll r \ll \xi^{-1}$, где r_0 – радиус ближних корреляций, имеющий порядок радиуса действия сил, и возникает при $r_0 \ll \xi^{-1}$, т.е. только в критической области. Точка ветвления спектра изменяет аналитические свойства и прямой корреляционной функции, связанной с полной соотношением ОЦ. Это приводит к тому, что возможен нецелый показатель степени критической изотермы δ .

При исследовании критической асимптотики в области $r_0 \ll r \ll \xi^{-1}$ можно опустить обращающийся в нуль член, определяющий классическую асимптотику. При этом в формуле (16) в случаях, когда подынтегральная функция не стремится на нижнем пределе к нулю, следует заменить нижний предел интегрирования на $n\xi$.

4. ДВУМЕРНЫЙ СЛУЧАЙ

В двумерном случае изложенный подход требует некоторой модификации.

Преобразование Фурье имеет вид

$$f(r) = 2\pi \int_0^\infty J_0(kr) \tilde{f}(k) k dk, \quad (22)$$

где J_0 – функция Бесселя. Соотношение ОЦ, выражения для обратной сжимаемости и ее производной по плотности имеют тот же вид, что и в трехмерном случае. Необходимо лишь заменить коэффициент $(2\pi)^{3/2}$ перед фурье-компонентами коэффициентом 2π .

Представление группы движений в двумерном случае осуществляют функции Макдональда $K_0(tr)$ [8], удовлетворяющие теореме сложения,

$$K_0(t|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) = \sum e^{in\theta} I_n(tr_1) K_n(tr_2), \quad r_1 < r_2. \quad (23)$$

Вместо интеграла Лапласа используется представление

$$f(r) = \int_0^\infty K_0(tr) \bar{f}(t) dt. \quad (24)$$

Действительно, выражая трехмерное расстояние через двумерное и усредняя по третьей координате z , получим

$$\int_0^\infty e^{-t\sqrt{r^2+z^2}} \frac{dz}{\sqrt{r^2+z^2}} = \int_0^\infty e^{-tr \operatorname{ch} u} du = K_0(tr).$$

Так как $\int_0^\infty K_0(tr) J_0(kr) r dr = 1/(t^2 + k^2)$, то из (24) следует

$$\tilde{f}(k) = \int_0^\infty \frac{\bar{f}(t) dt}{t^2 + k^2}, \quad (25)$$

т.е. и в этом случае функция $\bar{f}(t)$ является спектральной плотностью для функции $\tilde{f}(k)$.

Для определения радиуса и амплитуды главного члена асимптотики функции $h(r)$ представим ее в виде

$$f(r) = aK_0(\xi r) + h'(r), \quad (26)$$

что дает уравнения для обратного радиуса корреляции ξ и амплитуды главного асимптотического члена,

$$1 - \rho \int C(1, 2) d(2) + 2\pi\rho \int_0^\infty C(r)(I_0(\xi r) - 1)r dr = 0, \quad (27)$$

$$\frac{\xi^2}{a\pi\rho} = 2\pi\rho \int_0^\infty C(r)\xi r I_1(\xi r)r dr, \quad (28)$$

аналогичные уравнениям (14), (15). Из уравнения (28), так же как из (15), следует исчезновение в критической точке члена, определяющего классическую асимптотику.

При использовании представления (24), теоремы сложения и интеграла (25) соотношение ОП принимает в двумерном случае вид

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \frac{(\bar{h}(t) - \bar{C}(t)) dt}{t^2 + k^2} &= 2\pi\rho \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{\bar{h}(t)\bar{C}(t')}{(t^2 + k^2)(t'^2 + k^2)} dt dt' = \\ &= 2\pi\rho \int_0^\infty \frac{dt}{t^2 + k^2} \int_0^\infty P \frac{\bar{h}(t)\bar{C}(t') + \bar{h}(t')\bar{C}(t)}{t'^2 - t^2} dt', \end{aligned} \quad (29)$$

откуда в силу полноты на полуоси системы функций $K_0(tx)$, приводящей к появлению в обеих частях равенства (29) знаменателя $t^2 + k^2$, получим

$$\bar{h}(t) \left(1 - 2\pi\rho \int_0^\infty P \frac{\bar{C}(t') dt'}{t'^2 - t^2} \right) = \bar{C}(t) \left(1 + 2\pi\rho \int_0^\infty P \frac{\bar{h}(t') dt'}{t'^2 - t^2} \right). \quad (30)$$

Это соотношение аналогично соотношению (20) для трехмерного случая.

Существование кусочно-гладкой части спектра следует из формул [9]

$$\begin{aligned} K_0^2(\xi r) &= 2 \int_{2\xi}^\infty K_0(tr) \frac{dt}{\sqrt{t^2 - 4\xi^2}}, \\ K_0^3(\xi r) &= 8 \int_{3\xi}^\infty K_0(tr) \frac{dt}{t} \int_0^{\text{arch } \frac{t-\xi}{2\xi}} \frac{d\tau}{\sqrt{(1 - (\frac{2 \text{ch } \tau + 1}{t} \xi)^2)(1 - (\frac{2 \text{ch } \tau - 1}{t} \xi)^2)}}, \quad \dots, \end{aligned}$$

являющихся аналогом и результатом интегрирования формул (21) по третьей координате. Отсюда следует, как и в трехмерном случае, изменение аналитического характера асимптотики в критической области.

5. СТЕПЕННАЯ АСИМПТОТИКА

Рассмотрим возможность возникновения неклассической степенной асимптотики радиальной функции и ограничения на значение показателей этой асимптотики. Такая асимптотика существует на расстояниях $r_0 \ll r \ll \xi^{-1}$, волновые числа фурье-образов корреляционных функций и параметры спектральных плотностей ограничены условиями $\xi \ll k \ll r_0^{-1}$, $\xi \ll t \ll r_0^{-1}$. Таким образом, последующий анализ относится исключительно к окрестности критического состояния. При этом следует иметь в виду, что на спектральные плотности налагаются ограничения, которые требуют изменения их характера вне указанного интервала. Так как функции $f(r) = \{h(r), C(r)\}$ конечны при $r = 0$ и $f(0) = \int_0^\infty \bar{f}(t) dt / (rt)$, то интегралы $\int_0^\infty \bar{f}(t) dt / t = 0$ и $\int_0^\infty \bar{f}(t) dt = -f(0)$ сходятся как на нижнем, так и на верхнем пределах. Другие свойства интегралов от спектральных плотностей следуют из выражения (18) для фурье-образов $\tilde{f}(k)$ функций $f(r)$. В критической области

$$1 - 4\pi\rho \int_0^\infty \bar{C}(t) \frac{dt}{t^3} = 1 - (2\pi)^{3/2} \tilde{C}(0) \approx 0, \quad 4\pi\rho \int_0^\infty \bar{h}(t) \frac{dt}{t^3} \gg 1, \quad (31)$$

т.е. последний интеграл расходится на нижнем пределе.

С учетом того, что

$$\begin{aligned} 1 - 4\pi\rho \int_0^\infty P \frac{\bar{C}(t') dt'}{(t'^2 - t^2)t'} &= 1 - 4\pi\rho \int_0^\infty P \frac{\bar{C}(t')(t'^2 - t^2 + t^2) dt'}{(t'^2 - t^2)t'^3} = \\ &= 1 - (2\pi)^{3/2} \tilde{C}(0) - 4\pi\rho t^2 \int_0^\infty P \frac{\bar{C}(t') dt'}{(t'^2 - t^2)t'^3} \approx -4\pi\rho t^2 \int_0^\infty P \frac{\bar{C}(t') dt'}{(t'^2 - t^2)t'^3}, \\ 1 + 4\pi\rho \int_0^\infty P \frac{\bar{h}(t') dt'}{(t'^2 - t^2)t'} &\approx 4\pi\rho \int_0^\infty P \frac{\bar{h}(t') dt'}{(t'^2 - t^2)t'}, \end{aligned}$$

соотношение (20) в критической области приводится к виду

$$-\bar{h}(t)t^2 \int_0^\infty P \frac{\bar{C}(t') dt'}{(t'^2 - t^2)t'^3} = \bar{C}(t) \int_0^\infty P \frac{\bar{h}(t') dt'}{(t'^2 - t^2)t'}. \quad (32)$$

Из степенного поведения функций $h(r) = A/r^{1+\eta}$, $C(r) = B/r^{3+\gamma}$ следует, что $\bar{h}(t) = At^\eta/\Gamma(\eta)$, $\bar{C}(t) = Bt^{2+\gamma}/\Gamma(2+\gamma)$. При подстановке последних равенств в соотношение (32) получаем

$$-\int_0^\infty P \frac{t^{\gamma-1} dt}{t^2 - 1} = \int_0^\infty P \frac{t^{\eta-1} dt}{t^2 - 1} \equiv -\int_0^\infty P \frac{t^{-\eta+1} dt}{t^2 - 1}, \quad (33)$$

откуда следует связь показателей $\eta + \gamma = 2$ (так как $\int_0^\infty P t^{\gamma-1} dt / (1 - t^2) = (\pi/2) \times \operatorname{ctg}(\pi\gamma/2)$, то можно записать эту связь в виде $\eta + \gamma = 2 + 2n$. Однако значения $n \neq 0$ приводят к расходимости одного либо обоих интегралов и должны быть исключены).

При исследовании соотношения ОЦ (3) для фурье-образов функций h и C в критической области следует учесть, что

$$\begin{aligned} (2\pi)^{3/2} \rho \tilde{h}(k) &= 4\pi\rho \int_0^\infty \frac{\bar{h}(t) dt}{(t^2 + k^2)t} \gg 1, \\ 1 - (2\pi)^{3/2} \rho \tilde{C}(k) &= 1 - 4\pi\rho \int_0^\infty \frac{\bar{C}(t)(t^2 + k^2 - k^2) dt}{(t^2 + k^2)t^3} = \\ &= 1 - (2\pi)^{3/2} \rho \tilde{C}(0) + 4\pi\rho k^2 \int_0^\infty \frac{\bar{C}(t) dt}{(t^2 + k^2)t^3} \approx 4\pi\rho k^2 \int_0^\infty \frac{\bar{C}(t) dt}{(t^2 + k^2)t^3}. \end{aligned}$$

Используя аппроксимацию $\bar{h}(t) = At^\eta/\Gamma(\eta)$, $\bar{C}(t) = Bt^{2+\gamma}/\Gamma(2+\gamma)$ и значение интеграла $\int_0^\infty t^{\eta-1} dt/(1+t^2) = \pi/(2 \sin \frac{\pi\eta}{2})$, приведем соотношение (3) к виду

$$\frac{4\pi^4 AB \rho^2 k^{\eta+\gamma-2}}{\Gamma(\eta)\Gamma(\gamma+2) \sin \frac{\pi\eta}{2} \sin \frac{\pi\gamma}{2}} \approx 1, \quad (34)$$

откуда вновь следует связь $\eta + \gamma = 2$.

Из гипотезы о степенной связи прямой и полной корреляций $C(r) \sim (h(r))^\delta$ следует, что $(1+\eta)\delta = 3+\gamma$. Отсюда окончательно получаем, что

$$\eta = \frac{6}{\delta+1} - 1, \quad \gamma = 3 - \frac{6}{\delta+1}. \quad (35)$$

Найденные выражения (35) совпадают с известными [1]–[3].

Из интегрируемости функции $C(r)$ следует, что $\gamma > 0$ и $\delta > 2$. Из условия $\eta > 0$ следует $\delta < 5$. При $\delta = 5$ интеграл (16) расходится на нижнем пределе, этот предел должен быть обрзан на величине порядка $n\xi$, что приводит к неклассической асимптотике

$$h(r) = A \int_{n\xi}^\infty e^{-tr} \frac{dt}{tr} = \frac{A}{r} \text{Ei}(-n\xi r), \quad (36)$$

практически совпадающей с асимптотикой (7) при малых η . Двумерный случай исследуется аналогично. Условия интегрируемости спектральной плотности и ограничение на значение интеграла от нее следуют из того, что при малых x функция Макдональда $K(x) \approx \ln(1/x)$. Неклассическая асимптотика $h(r) \sim r^\eta$, $C(r) \sim r^{2+\gamma}$ определяет поведение спектральной плотности в критической области: $\bar{h}(t) \sim 2^{2-\eta} t^{\eta-1}/\Gamma^2(\eta/2)$ и аналогично для $C(r)$.

Дальнейший анализ проводится практически таким же образом и приводит к той же связи показателей $\eta + \gamma = 2$. Из гипотезы о степенной связи прямой и полной корреляционных функций следует, что $2 + \gamma = \eta\delta$ и

$$\eta = \frac{4}{\delta+1}, \quad \gamma = 2 \frac{\delta-1}{\delta+1}.$$

ПРИЛОЖЕНИЕ

Выражения для старших прямых корреляций C_n можно получить, используя метод производящего функционала [4]. Зависящая от изменений дополнительного внешнего поля плотность

$$\rho(1) = \frac{(1 + u(1))\delta W(u)}{\delta u(1)} \equiv (1 + u(1))W_1(1),$$

где $W = \ln L(u)$ и $L(u)$ – производящий функционал частичных плотностей, введенный Боголюбовым. Функциональное касательное преобразование

$$\widetilde{W} = W + \int \left[\rho(q) \ln \frac{\rho(q)}{1 + u(q)} - \rho(q) - \rho^0(q) \ln \rho^0(q) + \rho^0(q) \right] dq, \quad (\text{П.1})$$

где ρ^0 – фиксированная, неварьируемая плотность, определяет систему функций $C_n(1, \dots, n) \equiv \widetilde{W}_n(1, \dots, n) \equiv \delta^n \widetilde{W} / (\delta \rho(1) \dots \delta \rho(n))$. Из выражения (П.1) имеем

$$\begin{aligned} \widetilde{W}_1(1) &= \ln[\rho(1)/(1 + u(1))] = \ln W_1(1), \\ \widetilde{W}_2(1, 2) &= \frac{\delta(1, 2)}{\rho(1)} - \frac{\delta u(1)}{(1 + u(1))\delta \rho(1)} = \int \frac{W_2(1, q)}{W_1(1)W_1(q)} \frac{\rho(q)}{1 + u(q)} \frac{\delta u(q)}{\delta \rho(2)} dq. \end{aligned}$$

Так как $W_2(1, 2)/(W_1(1)W_1(2)) = h_2(1, 2)$, то

$$C_2(1, 2) = \int h_2(1, q)[\delta(2, q) - C_2(2, q)\rho(q)] dq, \quad (\text{П.2})$$

т.е. C_2 удовлетворяет соотношению ОЦ и функции C_n являются прямыми корреляционными функциями.

Выражение для C_3 получим, варьируя соотношение (П.2),

$$\begin{aligned} &\int C_3(1, 3, q)[\delta(2, q) + h_2(2, q)\rho(q)] dq + C_2(1, 3)h_2(2, 3) = \\ &= \int \frac{\delta h_2(2, q)}{\delta \rho(3)} [\delta(1, q) - C_2(1, q)\rho(q)] dq. \end{aligned}$$

Умножим это выражение на $[\delta(2, 2') - C_2(2, 2')\rho(2)] d(2)$. Взяв интеграл по $d(2)$, с учетом соотношения ОЦ и того, что

$$\begin{aligned} \frac{\delta h_2(2, q)}{\delta \rho(3)} &= \int \frac{\delta h_2(2, q)}{\delta u(q')} \frac{\delta u(q')}{\delta \rho(3)} dq' = \int [h_3(2, q, q') - \\ &- h_2(2, q')h_2(2, q) - h_2(q, q')h_2(2, q)][\delta(q', 3) - C_2(q', 3)\rho(q')] dq', \end{aligned}$$

получим, изменив нумерацию переменных,

$$\begin{aligned} C_3(1, 2, 3) &= \int [h_3(4, 5, 6) - h_2(4, 5)h_2(4, 6) - h_2(4, 5)h_2(5, 6)] \times \\ &\times \prod [\delta(i, i+3) - C_2(i, i+3)\rho(i+3)] d(4, 5, 6) - C_2(1, 3)C_2(2, 3) = \\ &= \int [h_3(4, 5, 6) - h_2(4, 5)h_2(4, 6) - h_2(4, 5)h_2(5, 6) - h_2(4, 6)h_2(5, 6)] \times \\ &\times \prod [\delta(i, i+3) - C_2(i, i+3)\rho(i+3)] d(4, 5, 6) - \\ &- \int C_2(1, q)C_2(2, q)C_2(3, q)\rho(q) dq. \end{aligned}$$

Выражения для C_n при $n > 3$ можно получить очевидным, но весьма громоздким варьированием последнего выражения.

Из полученного выражения следует так же условие выполнимости равенства

$$1 + \rho^2 \int C_3(1, 2, 3) d(2, 3) = 0$$

в критической точке. Имеем

$$1 + \rho^2 \int C_3(1, 2, 3) d(2, 3) = \rho^2 \left(1 - \rho \int C_2(1, 2) d(2) \right)^3 \int \left[h_3(1, 2, 3) - \sum h_2(i, j) h_2(i, k) \right] d(2, 3) + 1 - \left(\rho \int C_2(1, 2) d(2) \right)^3. \quad (\text{П.3})$$

Следовательно, интеграл от h_3 должен расходиться не сильнее (по каждому из двух расстояний), чем интеграл от h_2 .

Благодарности. Работа выполнена при поддержке Минобразования России, грант УР 01.01.002.

Список литературы

- [1] *Р. Балеску.* Равновесная и неравновесная статистическая механика. Т. 1. М.: Мир, 1978.
- [2] *Дж. Рашбрук.* Равновесные теории жидкого состояния. В сб.: Физика простых жидкостей. Ред. Г. Темперли, Дж. Роулинсон, Дж. Рашбрук. Т. 1. М.: Мир, 1971. С. 30–62.
- [3] *Ш. Ма.* Современная теория критических явлений. М.: Мир, 1980.
- [4] *Э. А. Аринштейн.* Функциональные преобразования в теории частичных функций распределения. В сб.: Проблемы статистической физики. Тр. Тюменского гос. ун-та. Ред. Э. А. Аринштейн. Тюмень: ТюмГУ, 1976. С. 25–50.
- [5] *Б. Г. Абросимов, Э. А. Аринштейн.* Журн. структ. химии. 1969. Т. 10. № 2. С. 320–326.
- [6] *Э. А. Аринштейн.* ДАН СССР. 1969. Т. 189. № 5. С. 502–505.
- [7] *Э. А. Аринштейн.* Соотношение Орнштейна–Цернике в критической области. В сб.: Физика жидкого состояния. Ред. А. С. Кривошея. Киев: Лыбидь, 1990. № 18. С. 121–128.
- [8] *Н. Я. Виленкин.* Специальные функции и теория представлений групп. М.: Наука, 1965.
- [9] *Г. Бейтман, А. Эрдейн.* Таблица интегральных преобразований. Т. 2. М.: Наука, 1970.

Поступила в редакцию 27.XII.2002 г.