

МЕТОД ТЕНЗОРНЫХ ПОЛЕЙ В ТЕОРИИ ЛИНЕЙНОГО ОТКЛИКА

В.В.Зубков, Д.А.Майфат, К.Ю.Яшкин

TENSOR FIELD METHOD IN THE LINEAR RESPONSE THEORY

V.V.Zubkov, D.A.Mayfat, K.Yu.Yashkin

Тверской государственный университет имени, victor.v.zubkov@gmail.com

Предложен новый метод вычисления функций распределения, характеризующих степень неоднородности макроскопических сред. Введенные функции распределения строятся на основе процедуры сглаживания по определенному объему, величину которого можно выбирать достаточно произвольно, в зависимости от типа поставленной задачи. Показано, что функции распределения могут быть выражены в терминах локальных тензорных полей, использование которых упрощает процедуру замыкания иерархии кинетических уравнений благодаря прозрачному физическому смыслу тензорных полей. На основе предложенного метода рассмотрена задача линейного отклика и получено аналитическое выражение для реакции локальной плотности среды на малое внешнее механическое возмущение. Показано, что полученное выражение для распределения плотности совпадает с результатом расчетов, проведенных на основе производящего функционала в эргодическом приближении Вейля.

Ключевые слова: кинетические уравнения; тензорные поля; стабильные межатомные потенциалы; линейный отклик

Для цитирования: Зубков В.В., Майфат Д.А., Яшкин К.Ю. Метод тензорных полей в теории линейного отклика // Вестник НовГУ. Сер.: Технические науки. 2022. №3(128). С.21–25. DOI: [https://doi.org/10.34680/2076-8052.2022.3\(128\).21-25](https://doi.org/10.34680/2076-8052.2022.3(128).21-25)

A new method for calculating distribution functions characterizing the degree of heterogeneity of macroscopic media is proposed. The introduced distribution functions are based on the smoothing procedure for a certain volume. The volume value is selected depending on the task of the study. It is shown that the distribution functions can be expressed in terms of local tensor fields, the use of which simplifies the procedure for closing the hierarchy of kinetic equations due to the transparent physical meaning of tensor fields. Based on the proposed method, the linear response problem is considered and an analytical expression for the reaction of the local density of the medium to a small external mechanical disturbance has been obtained. It is shown that the derived expression for the density distribution coincides with the result of the calculations carried out on the basis of the generating functional in the ergodic Weyl approximation.

Keywords: kinetic equations; tensor fields; stable interatomic potentials; linear response

For citation: Zubkov V.V., Mayfat D.A., Yashkin K.Yu. Tensor field method in the linear response theory // Vestnik NovSU. Issue: Engineering Sciences. 2022. №3(128). P.21–25. DOI: [https://doi.org/10.34680/2076-8052.2022.3\(128\).21-25](https://doi.org/10.34680/2076-8052.2022.3(128).21-25)

1. Введение

Связь микроскопических характеристик среды с макроскопическими характеристиками принято осуществлять в рамках статистической механики. На этом пути можно использовать метод производящего функционала или метод интегральных уравнений для функций распределения [1]. Одной из главных задач статистической механики неравновесных процессов — изучение влияния внешних малых возмущений, приводящих к изменению параметров равновесной многочастичной системы. Среди различных причин, приводящих к этим возмущениям, можно выделить работу, совершаемую внешними силами, взаимодействие с другими системами или включение внешнего поля [2]. Под механическими возмущениями понимают действие внешних полей, учет которых производится добавлением соответствующей энергии взаимодействия системы с полем. Влияние возмущения, вызванного внешним полем, как правило, исследуется в рамках теории запаздывающих двухвременных функций Грина [2] с использованием производящего функционала [1,3], а также в рамках классического метода функционала плотности (МФП) [4,5].

Несомненным преимуществом МФП является его относительная простота. Однако для МФП требуется информация как минимум о двухчастичной функции распределения, которую, в свою очередь, можно получить из теории БГКИ [1,6]. Метод функций распределения [6] в принципе позволяет упростить решение задач статистической механики в силу возможности введения физически обоснованных предположений о связи между одночастичной и двухчастичной функциями распределения. Несколько сложнее дело обстоит с трехчастичной и более высокого порядка функциями распределения.

В настоящей работе предложен метод построения системы сглаженных функций распределения на основе введения локальных тензорных полей, характеризующих микроскопическое распределение частиц внутри объема сглаживания. Предложенный метод обладает более ясной физически схемой построения функций распределения, свойственной иерархии БГКИ. На основе предложенного метода изучена линейная реакция простой однокомпонентной системы на внешнее механическое возмущение и получено аналитическое выражение, связывающее возмущение плотности среды с потенциалом внешнего поля.

2. Локальные тензорные поля

При работе с системами, содержащими большое число частиц, важно корректно осуществить переход от микроскопического к макроскопическому описанию явлений, что, несомненно, является одной из важнейших задач современной физики.

Динамику микроскопической системы удобно описывать с помощью микроскопической фазовой плотности, впервые введенной Ю.Л.Климонтовичем [7]

$$f^{micro}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i(t)) \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}_i(t)). \quad (1)$$

Для перехода к описанию макроскопических свойств примем следующую процедуру сглаживания, широко применяемую в работах Кузьменкова с соавторами [8,9]. Мысленно разобьем область, занимаемую системой из N частиц, на малые, не зависящие от времени объемы $\Delta(\mathbf{r})$. Пусть $N(\mathbf{r}, t)$ — число частиц в объеме $\Delta(\mathbf{r})$. Величина объема $\Delta(\mathbf{r})$ может выбираться достаточно произвольно в зависимости от задачи исследования. Например, если число частиц радиуса r_0 в таком объеме определить как $N(\mathbf{r}, t) \approx (nr_0^3)^{-5/4}$ (здесь n — средняя концентрация частиц), то с помощью такого разбиения возможно единое описание как кинетических, так и газодинамических процессов [10].

Далее, каждой микроскопической динамической аддитивной величине χ_i , которой соответствует

$$\chi(\mathbf{r}, t) = \sum_{i=1}^N \chi_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i(t)),$$

можно сопоставить полевую функцию $\psi(\mathbf{r}, t)$ с помощью оператора сглаживания $\hat{S}$ [9]:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \hat{S}[\chi(\mathbf{r}, t)] \equiv \frac{1}{\Delta} \sum_{i=1}^{N(\mathbf{r}, t)} \chi_i = \frac{1}{\Delta} \int \chi(\mathbf{r} + \xi, t) d^3\xi. \quad (2)$$

Например, сглаженная (или средняя) плотность частиц в объеме $\Delta(\mathbf{r})$ имеет вид:

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\Delta} \sum_{i=1}^{N(\mathbf{r}, t)} m_i = \frac{1}{\Delta} \int \sum_{i=1}^N m_i \delta(\mathbf{r} + \xi - \mathbf{r}_i(t)) d^3\xi. \quad (3)$$

Определим теперь макроскопическую фазовую плотность как сглаженную микроскопическую плотность (1):

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \frac{1}{\Delta} \sum_{i=1}^N \int \delta^3\xi \delta(\mathbf{r} + \xi - \mathbf{r}_i(t)) \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}_i(t)). \quad (4)$$

Существенно, что сглаживание проводится только по конфигурационному подпространству. Проводя дополнительное сглаживание по импульсному подпространству, мы отсекали бы некоторое множество из возможных значений импульсов частиц, находящихся в объеме $\Delta(\mathbf{r})$. Это, во-первых, привело бы к неизбежным погрешностям, а во-вторых, могло бы привести к искусственной неинвариантности полученных уравнений движения по отношению к обращению времени.

Интегрируя по импульсному подпространству, приходим к одночастичной функции распределения

$$f(\mathbf{r}, t) = n(\mathbf{r}, t) = \int f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) d^3\mathbf{p} = \frac{1}{\Delta} \int \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r} + \xi - \mathbf{r}_i(t)) d^3\xi, \quad (5)$$

имеющей смысл концентрации частиц в точке $\mathbf{r}$ в момент времени t . Под концентрацией в точке понимается средняя концентрация в объеме $\Delta(\mathbf{r})$ вблизи точки $\mathbf{r}$. Аналогично можно ввести двухчастичную функцию распределения, используемую в дальнейшем:

$$f_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2, t) = \frac{1}{\Delta} \int \sum_{i=1}^N \sum_{k=1, k \neq i}^N \delta(\mathbf{r}_1 + \xi - \mathbf{r}_i(t)) \delta(\mathbf{r}_2 + \xi - \mathbf{r}_k(t)) \times \\ \times \delta(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_i(t)) \delta(\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_k(t)) d^3\xi. \quad (6)$$

Например, потенциальной энергии взаимодействия частиц $U_{ik}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_k|)$ на микроуровне соответствует сглаженная величина, имеющая смысл объемной плотности этой энергии:

$$U(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\Delta} \int \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{k=1, k \neq i}^N U_{ik}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_k|) \delta(\mathbf{r} + \xi - \mathbf{r}_i(t)) d^3\xi = \\ = \frac{1}{2} \int d^3\mathbf{R} U(\mathbf{R}) F_2(\mathbf{r} - \mathbf{R}, \mathbf{r}, t). \quad (7)$$

Здесь $F_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)$ — проинтегрированная по импульсному подпространству двухчастичная функция распределения (6). Приведенные функции (4) и (6) являются примерами динамических функций распределения.

Дифференцируя по времени функцию (4), получим уравнение

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)}{\partial \mathbf{r}} = \\ = \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \int d^3\mathbf{p}' \int d^3\mathbf{R} \frac{\partial U(\mathbf{R})}{\partial \mathbf{R}} f_2(\mathbf{r}, \mathbf{p}, \mathbf{r} - \mathbf{R}, \mathbf{p}', t). \quad (8)$$

Здесь $U(\mathbf{R})$ — потенциал межчастичного взаимодействия. Заметим, что уравнение (8) напоминает первое уравнение иерархии БГКИ [1,6]. В теории БГКИ для поиска двухчастичной функции распределения необходимо записать для нее интегродифференциальное уравнение, которое будет неизбежно содержать трехчастичную функцию распределения. В предлагаемом нами методе для поиска двухчастичной функции распределения в этом нет необходимости. Для поиска двухчастичной функции распределения

$$f_2(\mathbf{r}, \mathbf{p}, \mathbf{r} - \mathbf{R}, \mathbf{p}', t) = \frac{1}{\Delta} \int d^3\xi \sum_i \sum_{j \neq i} \delta(\mathbf{r} + \xi - \mathbf{r}_i(t)) \times \\ \times \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}_i(t)) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R} + \xi - \mathbf{r}_j(t)) \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}_j(t)) \quad (9)$$

представим ее в виде

$$f_2(\mathbf{r}, \mathbf{p}, \mathbf{r} - \mathbf{R}, \mathbf{p}', t) = \frac{1}{\Delta^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int d^3\mathbf{r}' \int_{\Delta(\mathbf{r}')} d^3\xi' \int_{\Delta(\mathbf{r})} d^3\xi \times \\ \times \sum_i \sum_{j \neq i} \delta(\mathbf{r} + \xi - \mathbf{r}_i(t)) \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}_i(t)) \prod_{k=0}^n (\xi^{\alpha_k} - \xi'^{\alpha_k}) \times \\ \times \partial_{\alpha_k} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}' - \mathbf{R}) \delta(\mathbf{r}' + \xi' - \mathbf{r}_j(t)) \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}_j(t)) \quad (10)$$

Оставляя в сумме по n нулевое, первое и т.д. слагаемые, мы будем получать соответствующие приближения для двухчастичной функции распределения. Например, в нулевом приближении имеем

$$f_2(\mathbf{r}, \mathbf{p}, \mathbf{r} - \mathbf{R}, \mathbf{p}', t) = f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) f(\mathbf{r} - \mathbf{R}, \mathbf{p}', t). \quad (11)$$

Это выражение отвечает отсутствию корреляций в расположении частиц. В первом же приближении, оставляя только два слагаемых в разложении, получим

$$\begin{aligned} f_2(\mathbf{r}, \mathbf{p}, \mathbf{r} - \mathbf{R}, \mathbf{p}', t) = \\ = f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) f(\mathbf{r} - \mathbf{R}, \mathbf{p}', t) + Q^\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \partial_\alpha f(\mathbf{r} - \mathbf{R}, \mathbf{p}', t) - \\ - f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \partial_\alpha Q^\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{R}, \mathbf{p}', t). \end{aligned} \quad (12)$$

Здесь $Q^\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ — векторное поле смещений частиц относительно центра $\mathbf{r}$ малого объема $\Delta(\mathbf{r})$:

$$Q^\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \frac{1}{\Delta} \int \sum_{i=1}^N \xi^\alpha \delta(\mathbf{r} + \xi - \mathbf{r}_i(t)) \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}_i(t)) d^3 \xi. \quad (13)$$

Во втором приближении

$$\begin{aligned} f_2(\mathbf{r}, \mathbf{p}, \mathbf{r} - \mathbf{R}, \mathbf{p}', t) = f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) f(\mathbf{r} - \mathbf{R}, \mathbf{p}', t) + \\ + Q^\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \partial_\alpha f(\mathbf{r} - \mathbf{R}, \mathbf{p}', t) - f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \partial_\alpha Q^\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{R}, \mathbf{p}', t) + \\ + \frac{1}{2} Q^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \partial_\alpha \partial_\beta f(\mathbf{r} - \mathbf{R}, \mathbf{p}', t) - \\ - Q^\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \partial_\alpha \partial_\beta Q^\beta(\mathbf{r} - \mathbf{R}, \mathbf{p}', t) + \\ + \frac{1}{2} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \partial_\alpha \partial_\beta Q^{\alpha\beta}(\mathbf{r} - \mathbf{R}, \mathbf{p}', t). \end{aligned} \quad (14)$$

Здесь $Q^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \frac{1}{\Delta} \int \sum_{i=1}^N \xi^\alpha \xi^\beta \delta(\mathbf{r} + \xi - \mathbf{r}_i(t)) \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}_i(t)) d^3 \xi$ — локальное тензорное поле второго ранга (некий квадрупольный момент), описывающее неоднородность в распределении частиц внутри объема $\Delta(\mathbf{r})$.

В общем случае можно ввести тензорные поля более высокого ранга $Q^{\alpha\beta\gamma\dots}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$, которые более детально описывают неоднородность в распределении частиц в объеме $\Delta(\mathbf{r})$. Для таких тензорных полей в общем случае справедливо уравнение

$$\begin{aligned} \frac{\partial Q^{\alpha\beta\dots\alpha_\gamma}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \frac{\partial Q^{\alpha\beta\dots\alpha_\gamma}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)}{\partial \mathbf{r}} = \\ = \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \int d^3 \mathbf{R} \frac{\partial U(\mathbf{R})}{\partial \mathbf{R}} \int d^3 \mathbf{p}' \frac{1}{\Delta} \int \prod_{k=0}^{\gamma} \xi^{\alpha_k} d^3 \xi \times \\ \times \sum_i \sum_{j \neq i} \delta(\mathbf{r} + \xi - \mathbf{r}_i(t)) \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}_i(t)) \times \\ \times \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R} + \xi - \mathbf{r}_j(t)) \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}_j(t)), \end{aligned} \quad (15)$$

которое легко получить дифференцированием по времени тензорного поля $Q^{\alpha\beta\dots}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$.

Таким образом, функции распределения могут быть представлены в виде разложения по тензорным полям различного ранга. Эти локальные тензорные поля имеют ясный физический смысл, схожий с мультипольными представлениями. Поиск функций распределения сводится к поиску тензорных полей, удовлетворяющих уравнению (15). Следуя вышеизложенному методу, при включении внешнего поля $U^{ext}(\mathbf{r})$ в левую часть равенства интегро-дифференциальных уравнений для тензорных полей (15) необходимо добавить дополнительное слагаемое

$$\begin{aligned} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{\alpha_0} \sum_{\alpha_1} \dots \sum_{\alpha_n \neq \alpha_\gamma} \frac{\partial^n U^{ext}(\mathbf{r})}{\partial x^{\alpha_0} \partial x^{\alpha_1} \dots \partial x^{\alpha_n}} \right] \times \\ \times \frac{\partial Q^{(\alpha\beta\dots\alpha_\gamma, \alpha_0 \alpha_1 \dots \alpha_n)}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)}{\partial \mathbf{p}}. \end{aligned} \quad (16)$$

3. Уравнение линейного отклика

В дальнейшем ограничимся случаем равновесных систем. Более того, будем рассматривать случай (11), когда можно пренебречь тензорными полями, ранга больше нулевого, т.е. корреляциями в расположении частиц. Переходя к конфигурационному пространству, перепишем уравнение (8) с учетом внешнего поля (16) в виде

$$\frac{\partial n(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} = -\beta \int d^3 \mathbf{r}' \frac{\partial U(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{\partial \mathbf{r}} n(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}') - \beta n(\mathbf{r}) \frac{\partial U^{ext}(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}}, \quad (17)$$

в котором $\beta = 1/\theta$ — обратная термодинамическая температура, $n(\mathbf{r})$ — локальная плотность (концентрация) расположения частиц (5).

В предположении линейного отклика локальная плотность $n(\mathbf{r})$ представима в виде

$$n(\mathbf{r}) = n_b + \varepsilon(\mathbf{r}), \quad (18)$$

в котором n_b — средняя плотность в отсутствии внешнего поля, $\varepsilon(\mathbf{r}) < n_b$ — малое возмущение плотности. В этом случае уравнение (18) принимает вид

$$\frac{1}{n_b} \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} = -\beta \int d^3 \mathbf{r}' \frac{\partial U(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{\partial \mathbf{r}} (n_b + \varepsilon(\mathbf{r}')) - \beta \frac{\partial U^{ext}(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}}. \quad (19)$$

С учетом асимптотического условия

$$|\mathbf{r}| \rightarrow \infty \Rightarrow U^{ext}(\mathbf{r}) = 0, n(\mathbf{r}) = n_b, \quad (20)$$

интегральное уравнение (18) принимает вид

$$\varepsilon(\mathbf{r}) = -\beta n_b \int d^3 \mathbf{r}' U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \varepsilon(\mathbf{r}') - \beta n_b U^{ext}(\mathbf{r}). \quad (21)$$

Учитывая, что относительно пространственных переменных уравнение (21) содержит интеграл типа свертки, для решения уравнения перейдем в обратное $\mathbf{k}$ -пространство. Для того чтобы преобразование

$$U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 \mathbf{k} \tilde{U}(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \quad (22)$$

имело физический смысл, используемые модельные потенциалы должны удовлетворять критерию устойчивости Добрушина — Рюэля — Фишера [11]:

$$\tilde{U}(\mathbf{k}) \geq 0. \quad (23)$$

В $\mathbf{k}$ -пространстве уравнение (21) примет вид:

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 \mathbf{k} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} (\tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}) + \beta n_b \tilde{U}(\mathbf{k}) \tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}) + \beta n_b \tilde{U}^{ext}(\mathbf{k})) = 0. \quad (24)$$

Уравнению (24) удовлетворяет решение:

$$\tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}) = -\frac{\beta n_b \tilde{U}^{ext}(\mathbf{k})}{1 + \beta n_b \tilde{U}(\mathbf{k})}. \quad (25)$$

Используя обратное преобразование Фурье, находим возмущение плотности

$$\varepsilon(\mathbf{r}) = -\beta n_b U^{ext}(\mathbf{r}) + \beta n_b \int d^3 \mathbf{r}' R(\mathbf{r} - \mathbf{r}') U^{ext}(\mathbf{r}'), \quad (26)$$

в котором

$$R(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \int \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{\beta n_b \tilde{U}(\mathbf{k})}{1 + \beta n_b \tilde{U}(\mathbf{k})} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \quad (27)$$

Проведя интегрирование по углам в уравнении (25), получим окончательно уравнение линейного отклика, имеющего в используемом приближении вид интеграла свертки:

$$n(\mathbf{r}) - n_b = n_b \int d^3 \mathbf{r}' T(\mathbf{r} - \mathbf{r}', \beta) U^{ext}(\mathbf{r}'). \quad (28)$$

Здесь $T(\mathbf{r}-\mathbf{r}',\beta)$ — ядро интегрального преобразования, имеющее вид

$$T(\mathbf{r}-\mathbf{r}';\beta,n_b)=-\beta\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')+\frac{2\beta}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\int\frac{k}{(2\pi)^2}\frac{\beta n_b\tilde{U}(\mathbf{k})}{1+\beta n_b\tilde{U}(\mathbf{k})}\sin(k|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)dk. \quad (29)$$

Как видно, ядро преобразования (28) определяется температурой, плотностью массивной фазы n_b , расстоянием между частицами $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|$ и Фурье-трансформантой межчастичного потенциала.

В качестве примера применения полученного выражения (28) найдем профиль плотности для модельного флюида в поле плоской подложки. Межчастичное взаимодействие будем описывать двойным потенциалом Юкавы

$$U(\mathbf{r}-\mathbf{r}')=\frac{1}{4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}(Ae^{-a|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}-Be^{-b|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}), \quad (30)$$

Фурье-трансформанта которого удовлетворяет условию устойчивости (23), а поле подложки будем описывать потенциалом Морзе

$$U^{ext}(z)=D(e^{-2\alpha(z-z_{\min})}-2e^{-\alpha(z-z_{\min})})$$

Уравнение (28) в этом случае принимает вид

$$\begin{aligned} \frac{\eta(\tilde{z})}{\eta_b}= & 1-\tilde{\beta}[e^{-2\tilde{\alpha}(\tilde{z}-1)}-2e^{-\tilde{\alpha}(\tilde{z}-1)}]+ \\ & +g_1\tilde{\beta}\left[-\frac{2\tilde{\lambda}_1}{4\tilde{\alpha}^2-\tilde{\lambda}_1^2}e^{2\tilde{\alpha}(1-\tilde{z})}+\frac{1}{2\tilde{\alpha}-\tilde{\lambda}_1}e^{2\tilde{\alpha}-\tilde{\lambda}_1\tilde{z}}+ \right. \\ & \left. +\frac{4\tilde{\lambda}_1}{\tilde{\alpha}^2-\tilde{\lambda}_1^2}e^{(1-\tilde{z})\tilde{\alpha}}-\frac{2}{\tilde{\alpha}-\tilde{\lambda}_1}e^{\tilde{\alpha}-\tilde{\lambda}_1\tilde{z}}\right]+ \\ & +g_2\tilde{\beta}\left[-\frac{2\tilde{\lambda}_2}{4\tilde{\alpha}^2-\tilde{\lambda}_2^2}e^{2\tilde{\alpha}(1-\tilde{z})}+\frac{1}{2\tilde{\alpha}-\tilde{\lambda}_2}e^{2\tilde{\alpha}-\tilde{\lambda}_2\tilde{z}}+ \right. \\ & \left. +\frac{4\tilde{\lambda}_2}{\tilde{\alpha}^2-\tilde{\lambda}_2^2}e^{(1-\tilde{z})\tilde{\alpha}}-\frac{2}{\tilde{\alpha}-\tilde{\lambda}_2}e^{\tilde{\alpha}-\tilde{\lambda}_2\tilde{z}}\right], \end{aligned}$$

в котором

$$\tilde{\lambda}_2=\lambda_2 z_{\min}, \quad \tilde{\lambda}_1=\lambda_1 z_{\min}, \quad \tilde{\alpha}=\alpha z_{\min}, \quad \tilde{z}=\frac{z}{z_{\min}},$$

$$g_1=\frac{2z_{\min}\beta n_b C_1}{\lambda_1}, \quad g_2=\frac{2z_{\min}\beta n_b C_2}{\lambda_2}, \quad \tilde{\beta}=\beta D,$$

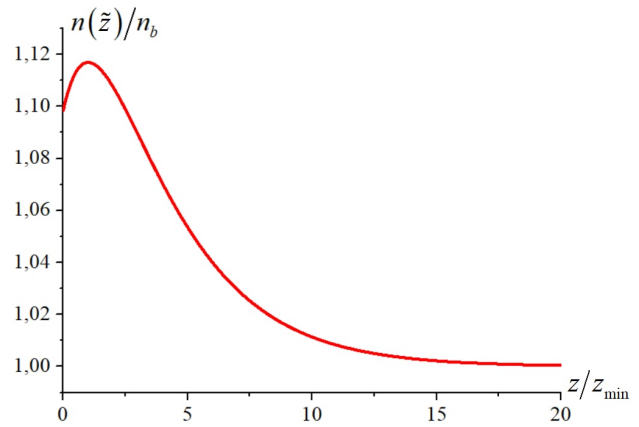
$$C_2=\frac{\lambda_2^2 C-D'}{2(\lambda_2^2-\lambda_1^2)}, \quad C_1=\frac{\lambda_1^2 C-D'}{2(\lambda_1^2-\lambda_2^2)},$$

$$C=A-B, \quad D'=Ab^2-Ba^2, \quad d=a^2b^2+n_b\beta Ab^2-n_b\beta Ba^2,$$

$$c=a^2+b^2+n_b\beta A-n_b\beta B,$$

$$\lambda_1=\frac{\sqrt{c-\sqrt{c^2-4d}}}{\sqrt{2}}, \quad \lambda_2=\frac{\sqrt{c+\sqrt{c^2-4d}}}{\sqrt{2}}.$$

Результаты расчетов представлены на рисунке. Параметры для поля выбирались таким образом, чтобы выполнялось условие малости внешнего поля. Как и следовало ожидать, в распределении плотности имеется локальный максимум, отвечающий минимуму потенциала подложки. С ростом расстояния от подложки плотность стремится к плотности массивной фазы.



Распределение плотности вблизи плоской подложки

Таким образом, предложенный метод позволяет рассчитать влияние внешнего воздействия на распределение плотности и, как следствие, например, адсорбционные характеристики поверхности.

4. Обсуждение и заключение

Основные результаты работы заключаются в следующем.

1. Показано, что функции распределения, свойственные макроскопическому описанию, могут быть разложены по локальным тензорным полям (10), характеризующим ту или иную степень неоднородности в расположении частиц среды. Поиск функций распределения сводится к поиску тензорных полей, физический смысл которых более прозрачен, что упрощает поиск условия замыкания иерархии (15).

2. Предложенный метод применен к задаче линейного отклика на внешнее механическое воздействие. Получено аналитическое выражение (28) для изменения плотности при включении поля $U^{ext}(\mathbf{r})$. Примечательно, что полученное выражение совпадает с результатом расчетов, проведенных на основе производящего функционала в эргодическом приближении Вейля [3].

5. Благодарности

Мы признательны проф. А.Ю.Захарову за плодотворное обсуждение ряда вопросов, касающихся результатов представленных исследований.

1. Боголюбов Н.Н. Собрание научных трудов: в 12 т. Т.5: Статистическая механика. Неравновесная статистическая механика. 1939-1980. М.: Наука, 2006. 804 с.
2. Зубарев Д.Н. Неравновесная статистическая термодинамика. М.: Наука, 1971. 416 с.
3. Zakharov A.Yu., Zubkov V.V., Folomeeva A.S. Generating functional of one-component classical systems in the ergodic approximation // Journal of Physics: Conference Series. 2020. Vol.1658. Article number: 012074. DOI: <http://doi.org/10.1088/1742-6596/1658/1/012074>
4. Lutsko J.F. Recent developments in classical density functional theory // Advances in Chemical Physics. 2010. Vol.144. P.1-92. DOI: <https://doi.org/10.1002/9780470564318.ch1>
5. Vrugt M., Löwen H., Wittkowski R. Classical dynamical density functional theory: from fundamentals to applications // Advances in Physics. 2020. Vol.69. №2. P.121-247. DOI: <https://doi.org/10.1080/00018732.2020.1854965>

6. Квасников И.А. Термодинамика и статистическая физика: в 3-х т. Т.2: Теория равновесных систем. М.: Едиториал УРСС, 2002. 432 с.
7. Klimontovich Yu.L. On the method of «second quantization» in phase space // JETP. 1958. Vol.6(33). №4 P.753–60.
8. Kuz'menkov L.S. Field form of dynamics and statistics of systems of particles with electromagnetic interaction // Theoretical and Mathematical Physics. 1991. Vol.86. P.159–168. DOI: <https://doi.org/10.1007/BF01016167>
9. Drofa M.A., Kuz'menkov L.S. Continual approach to multiparticle systems with long-range interaction. Hierarchy of macroscopic fields and physical consequences // Theoretical and Mathematical Physics 1996. Vol.108. P.848–859. DOI: <https://doi.org/10.1007/BF02070512>
10. Klimontovich Yu.L. Statistical theory of open systems. Vol.1: A unified approach to kinetic description of processes in active systems. Dordrecht: Springer, 1995. 569 p.
11. Захаров А.Ю. Теоретические основы физического материаловедения. Статистическая термодинамика модельных систем. 2 изд., испр. и доп. СПб.: Лань, 2016. 256 с.
4. Lutsko J.F. Recent developments in classical density functional theory. Advances in Chemical Physics, 2010, vol. 144, pp. 1–92. doi: <https://doi.org/10.1002/9780470564318.ch1>
5. Vrugt M., Löwen H., Wittkowski R. Classical dynamical density functional theory: from fundamentals to applications. Advances in Physics, 2020, vol. 69, no. 2, pp. 121–247. doi: <https://doi.org/10.1080/00018732.2020.1854965>
6. Kvasnikov I.A. Termodinamika i statisticheskaya fizika: v 3-kh t. T. 2. Teoriya ravnoesnykh sistem: Statisticheskaya fizika [Thermodynamics and statistical physics: in 3 volumes. Vol. 2. Theory of equilibrium systems: Statistical physics]. Moscow, Editorial URSS Publ., 2002. 432 p.
7. Klimontovich Yu.L. On the method of “second quantization” in phase space. JETP, 1958, vol. 6(33), no. 4, pp. 753–760.
8. Kuz'menkov L.S. Field form of dynamics and statistics of systems of particles with electromagnetic interaction. Theoretical and Mathematical Physics, 1991, vol. 86, pp. 159–168. doi: <https://doi.org/10.1007/BF01016167>
9. Drofa M.A., Kuz'menkov L.S. Continual approach to multiparticle systems with long-range interaction. Hierarchy of macroscopic fields and physical consequences. Theoretical and Mathematical Physics, 1996, vol. 108, pp. 848–859. doi: <https://doi.org/10.1007/BF02070512>
10. Klimontovich Yu.L. Statistical theory of open systems. Vol. 1: A unified approach to kinetic description of processes in active systems. Dordrecht, Springer Publ., 1995. 569 p.
11. Zakharov A.Yu. Teoreticheskiye osnovy fizicheskogo materialovedeniya. Statisticheskaya termodinamika model'nykh sistem. Statistical thermodynamics of model systems [Theoretical foundations of physical materials science. Statistical thermodynamics of model systems]. 2nd ed., rev. and add. St. Petersburg, Lan' Publ., 2016. 256 p.

References

1. Bogolyubov N.N. Sobraniye nauchnykh trudov: v 12 t. T. 5: Statisticheskaya mekhanika. Neravnovesnaya statisticheskaya mekhanika [Collection of scientific works in twelve volumes. Vol. 5: Nonequilibrium Statistical Mechanics]. Moscow, Nauka Publ., 2006. 804 p.
2. Zubarev D.N. Neravnovesnaia statisticheskaya termodinamika [Nonequilibrium statistical thermodynamics]. Moscow, Nauka Publ., 1971. 416 p.
3. Zakharov A.Yu., Zubkov V.V., Folomeeva A.S. Generating functional of one-component classical systems in the ergodic approximation. Journal of Physics: Conference Series, 2020,