

Р.В. РОМАНІК, О.А. ДОБУШ,
М.П. КОЗЛОВСЬКИЙ, І.В. ПИЛЮК, М.А. ШПОТ

Інститут фізики конденсованих систем імені І.Р. Юхновського НАН України
(Вул. Свенціцького, 1, Львів 79011; e-mail: romanik@ictp.lviv.ua)

ПАРНА ФУНКЦІЯ РОЗПОДІЛУ ДЛЯ КОМІРКОВОЇ МОДЕЛІ ПЛИНУ ЗІ ВЗАЄМОДІЄЮ КЮРІ-ВЕЙСА

УДК 539

Розглянуто парну функцію розподілу у комірковій моделі плинну зі взаємодією Кюрі-Вейса. Отримано одно- й двочастинкові функції розподілу. Результати підтверджують, що коміркова модель плинну зі взаємодією Кюрі-Вейса є середньо-польовим плинном.

Ключові слова: коміркова модель плинну, взаємодія Кюрі-Вейса, парна функція розподілу, n -частинкова функція розподілу.

1. Вступ

У літературі досліджувалися різні моделі систем багатьох частинок, що взаємодіють через м'які потенціали. Прикладами є модель проникних сфер [1–5], модель гаусового ядра [6–10] й узагальнена експоненціальна модель індексу 4 (GEM-4) [11, 12]. Досліджуючи такі системи в рамках ґраткового газу природно розглядати останній з багаточастинковим заповненням комірок [13, 14].

У цій статті досліджено модель коміркового плинну, представлену в роботах [15, 16] (це – модель, яка дозволяє багаточастинкове заповнення комірок), і отримано точний вираз для її парної функції розподілу у випадку взаємодії Кюрі-Вейса. У процесі аналізу також отримано одно- й двочастинкові функції розподілу. Результати підтверджують, що модель коміркового плинну зі взаємо-

дією Кюрі-Вейса є насправді середньо-польовим плинном.

2. Модель

Розглянемо відкриту систему точкових частинок в об'ємі $V \subset \mathbb{R}^3$ у тривимірному просторі. Загальний об'єм системи V розбивається на N_v конгруентних кубічних комірок Δ_l , $l \in \{1, \dots, N_v\}$, кожна з яких має об'єм v ; тобто об'єм V є об'єднанням усіх Δ_l :

$$V = \bigcup_{l=1}^{N_v} \Delta_l, \quad \Delta_l \cap \Delta_{l'} = \emptyset \text{ якщо } l \neq l', \quad (1)$$

$$V = vN_v. \quad (2)$$

Енергія взаємодії між частинками в конфігурації $\gamma_N = \{\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N\}$, де $\mathbf{r}_i$ – просторова координата i -ої частинки, а N – кількість частинок у конфігурації γ_N , визначається таким чином:

$$W_{N_v}(\gamma_N) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j \in \gamma} \Phi_{N_v}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j),$$

де Φ_{N_v} – взаємодія Кюрі-Вейса. Енергія двочастинкової взаємодії визначається виразом

$$\Phi_{N_v}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = -\frac{J_1}{N_v} + J_2 \sum_{l=1}^{N_v} \mathbb{I}_{\Delta_l}(\mathbf{r}_i) \mathbb{I}_{\Delta_l}(\mathbf{r}_j). \quad (3)$$

Цитування: Романік Р.В., Добуш О.А., Козловський М.П., Пилук І.В., Шпот М.А. Парна функція розподілу для коміркової моделі плинну зі взаємодією Кюрі-Вейса. *Укр. фіз. журн.* **71**, № 8, 667 (2026).

© Видавець ВД “Академперіодика” НАН України, 2026. Стаття опублікована за умовами відкритого доступу за ліцензією CC BY-NC-ND (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).

Перший член у Φ_{N_v} описує глобальне притягання Кюри–Вейсса (подібне до середнього поля) для будь-якої пари частинок у системі. Сила цього притягання задається енергетичним параметром $J_1 > 0$. Другий член у Φ_{N_v} описує локальне відштовхування між двома частинками, що містяться в одній комірі Δ_l , і характеризується параметром $J_2 > 0$. Тут $\mathbb{I}_{\Delta_l}(\mathbf{r})$ – це індикаторна функція комірки Δ_l ,

$$\mathbb{I}_{\Delta_l}(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1, & \mathbf{r} \in \Delta_l, \\ 0, & \mathbf{r} \notin \Delta_l. \end{cases} \quad (4)$$

Ми відсилаємо читача до робіт [15–17] для ознайомлення з більш детальним описом моделі. Фазові діаграми як у площинах температура–густина, так і тиск–температура представлені в роботі [18].

Введемо позначення, які будуть використовуватися в цій статті, й підсумуємо відомі результати для обраної моделі.

Велика статистична сума виражається таким чином:

$$\Xi = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{\zeta^N}{N!} \int_V \dots \int_V \exp[-\beta W_{N_v}(\gamma_N)] d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N, \quad (5)$$

де

$$\zeta = \frac{\exp(\beta\mu)}{\Lambda^3}$$

– це активність, $\beta = (k_B T)^{-1}$ – обернена температура, k_B – стала Больцмана, T – температура, μ – хімічний потенціал, $\Lambda = (2\pi\beta\hbar^2/m)^{1/2}$ – теплова довжина хвилі де Бройля, $\hbar$ – приведена стала Планка, і m – маса частинки. У великій статистичній сумі (5) інтегрування здійснюється за всіма конфігураціями з N частинками, а наступне підсумовування здійснюється за всіма додатніми цілими значеннями N .

Ми використовуємо такі стандартні безрозмірні змінні: приведена температура $T^* = k_B T/J_1$, приведений тиск $P^* = P v/J_1$, приведений хімічний потенціал $\mu^* = \mu/J_1$, приведена концентрація частинок $\rho^* = \frac{\langle N \rangle}{V} v = \frac{\langle N \rangle}{N_v}$, де P – тиск, а $\langle N \rangle$ – середня кількість частинок у системі, дужки позначають середнє значення по великому канонічному ансамблю. Концентрація частинок $\rho = \frac{\langle N \rangle}{V}$ також використовуватиметься в цій статті.

Для стійкості взаємодії має виконуватися умова $J_2 > J_1$. З цієї причини ми вводимо позначення $a = J_2/J_1$ і покладаємо $a = 1,2$ у цій роботі.

Точні асимптотичні вирази для великої статистичної суми були отримані в роботах [15, 16]. Тут ми представляємо результат у вигляді, наданому в роботі [17],

$$\Xi \simeq c_{N_v} \exp[N_v E(T^*, \mu^*; \bar{y}_{\max})], \quad (6)$$

що є асимптотично точним коли $N_v \rightarrow \infty$. Тут $\bar{y}_{\max}$ є функцією як T^* , так і μ^* , і знаходиться з умови глобального максимуму для величини

$$E(T^*, \mu^*; y) = -\frac{y^2}{2} T^* + \ln K_0(T^*, \mu^*; y),$$

де $K_0(T^*, \mu^*; y)$ – це 0-й член наступної сім'ї спеціальних функцій:

$$K_j(T^*, \mu^*; y) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n^j (v^* T^{*3/2})^n}{n!} \times \exp \left[\left(y + \frac{\mu^*}{T^*} \right) n - \frac{a}{2T^*} n^2 \right] \quad (7)$$

для $j = 0, 1, 2, \dots$, $v^* = v/\lambda^3$, і $\lambda = [2\pi\hbar^2/(mJ_1)]^{1/2}$. Величина c_{N_v} у виразі (6) не відіграє жодної важливої ролі в термодинамічній границі; тому ми не наводимо тут явного виразу для неї.

Для детального дослідження умов, необхідних для глобального максимуму E , і виведення співвідношень для $\bar{y}_{\max}$, ми рекомендуємо зацікавленим читачам звернутися до робіт [15–18]. У цій статті ми використовуємо розроблену методологію й результати, отримані в цих роботах, для вивчення структурних властивостей моделі, зокрема одно- та двочастинкових функцій розподілу, а також парної функції розподілу.

3. Парна функція розподілу

Функція розподілу $g^{(n)}$ для n частинок визначається через їхню концентрацію $\rho^{(n)}$ таким чином (для довідки див. [19, Розділ 2.6]):

$$g^{(n)}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n) = \frac{\rho^{(n)}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n)}{\prod_{i=1}^n \rho^{(1)}(\mathbf{r}_i)}, \quad (8)$$

де концентрація n частинок, визначена у великому канонічному ансамблі, дорівнює

$$\rho^{(n)}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n) = \frac{1}{\Xi} \sum_{N=n}^{\infty} \frac{\zeta^N}{(N-n)!} \times \int \exp[-\beta W_{N_v}(\gamma_N)] d\mathbf{r}_{n+1} \dots d\mathbf{r}_N. \quad (9)$$

У цій роботі наша мета – це обчислити парну функцію розподілу

$$g^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{\rho^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)}{\rho^{(1)}(\mathbf{r}_1)\rho^{(1)}(\mathbf{r}_2)}.$$

Отже, спочатку потрібно обчислити одно- та дво- частинкову функції розподілу.

3.1. Одночастинкова функція розподілу

Спочатку обчислимо $\rho^{(1)}$. За визначенням

$$\rho^{(1)}(\mathbf{r}_1) = \Xi^{-1} \sum_{N=1}^{\infty} \frac{\zeta^N}{(N-1)!} \times \int \exp[-\beta W_{N_v}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)] d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_N. \quad (10)$$

Застосовуючи метод, описаний у роботі [16], отримуємо такий результат:

$$\rho^{(1)}(\mathbf{r}_1) = \frac{K_1(T^*, \mu^*; \bar{y}_{\max})}{v K_0(T^*, \mu^*; \bar{y}_{\max})} = \frac{\rho^*(T^*, \mu^*)}{v}, \quad (11)$$

де застосована рівність [17, рівняння (42)]

$$\rho^* = \frac{K_1(T^*, \mu^*; \bar{y}_{\max})}{K_0(T^*, \mu^*; \bar{y}_{\max})}. \quad (12)$$

Отже, для розглянутої моделі коміркового плинку з взаємодією Кюри–Вейса ми отримали результат, відомий для однорідних систем, а саме: одночастинкова функція розподілу дорівнює середній концентрації частинок (див. роботу [19, Eq. (2.6.5)]),

$$\rho^{(1)}(\mathbf{r}_1) = \rho. \quad (13)$$

У даній теорії середнє значення чисел заповнення комірок n можна обчислити за допомогою міри ймовірності $Q_{T^*, \mu^*}(n)$ [16]:

$$Q_{T^*, \mu^*}(n) = \frac{1}{K_0(T^*, \mu^*; \bar{y}_{\max})n!} \left(v^* T^{*3/2}\right)^n \times \exp\left[\left(\bar{y}_{\max} + \frac{\mu^*}{T^*}\right)n - \frac{a}{2T^*}n^2\right], \quad n \in \mathbb{N}_0,$$

так що

$$\langle n \rangle_Q = \sum_{n=0}^{\infty} n Q_{T^*, \mu^*}(n),$$

усереднення відносно міри ймовірності $Q_{T^*, \mu^*}(n)$. Отже, можна записати такі рівності:

$$v\rho^{(1)}(\mathbf{r}_1) = \langle n \rangle_Q = \rho^*. \quad (14)$$

3.2. Двочастинкова функція розподілу

Тепер обчислимо двочастинкову функцію розподілу, яка визначається виразом

$$\rho^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \Xi^{-1} \sum_{N=2}^{\infty} \frac{\zeta^N}{(N-2)!} \times \int \exp[-\beta W_{N_v}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)] d\mathbf{r}_3 \dots d\mathbf{r}_N.$$

Для подальшого аналізу цього виразу ми знову дотримуємося методології, розробленої в роботі [16]. Однак важливо зазначити, що результат для $\rho^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ змінюється залежно від того, чи належать $\mathbf{r}_1$ і $\mathbf{r}_2$ до однієї комірки чи до різних комірок.

Якщо $\mathbf{r}_1$ та $\mathbf{r}_2$ належать до різних комірок, результат для $\rho^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ буде таким:

$$\rho^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \left[\frac{K_1(T^*, \mu^*; \bar{y}_{\max})}{v K_0(T^*, \mu^*; \bar{y}_{\max})} \right]^2 = \frac{\rho^{*2}}{v^2} = \frac{\langle n \rangle_Q^2}{v^2}. \quad (15)$$

З цього виразу й рівняння (11) одразу випливає результат для $g^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$:

$$g^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = 1, \quad \text{якщо } \nexists \Delta_l(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \in \Delta_l), \quad (16)$$

тобто, якщо $\mathbf{r}_1$ і $\mathbf{r}_2$ належать до різних комірок, парна функція розподілу $g^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ завжди дорівнює 1, тобто дорівнює значенню для ідеального газу.

Якщо $\mathbf{r}_1$ і $\mathbf{r}_2$ належать до однієї комірки, результат для $\rho^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ буде таким (пор. з [19, рівняння (2.6.4)]):

$$\rho^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{v^2} \sum_{n=0}^{\infty} n(n-1) Q_{T^*, \mu^*}(n) = \frac{\langle n(n-1) \rangle_Q}{v^2}. \quad (17)$$

Отже, для $g^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ отримуємо

$$g^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{\langle n(n-1) \rangle_Q}{\langle n \rangle_Q^2}, \quad \text{якщо } \exists \Delta_l(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \in \Delta_l). \quad (18)$$

Виходячи з рівнянь (16) і (18), загальний вираз для $g^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ набуває вигляду

$$g^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \begin{cases} 1, & \text{якщо } \nexists \Delta_l(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \in \Delta_l), \\ \frac{\langle n(n-1) \rangle_Q}{\langle n \rangle_Q^2}, & \text{якщо } \exists \Delta_l(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \in \Delta_l). \end{cases} \quad (19)$$

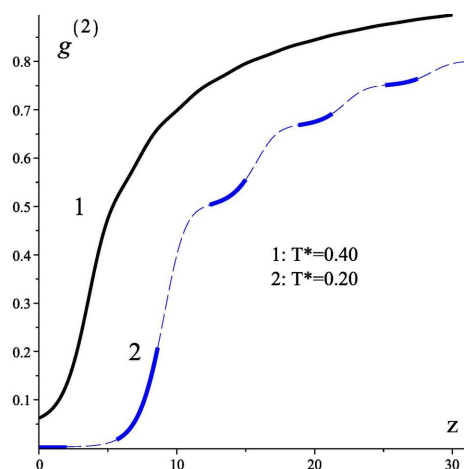


Рис. 1. Залежність парної функції розподілу $g^{(2)}$ від $\bar{z}$ для температур $T^* = 0,4$ (1, температура вища за $T_c^* \approx 0,25$) і $0,2$ (2, температура нижча за T_c^*). Ділянки на кривій, позначені жирними суцільними лініями 2 відповідають стабільним фазам, пунктирними лініями – метастабільним і нестабільним областям

Далі ми зосередимося переважно на функції розподілу $g^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ для випадку, де $\mathbf{r}_1$ і $\mathbf{r}_2$ перебувають в одній комірі. Перше, що слід зазначити, це те, що якщо $\mathbf{r}_1$ і $\mathbf{r}_2$ належать до однієї комірки, двочастинкова функція розподілу не залежить від положення частинок, тому для простоти можна просто записати $\rho^{(2)}$. Те ж саме, відповідно, стосується і $g^{(2)}$.

Перш ніж перейти до числових і графічних результатів для парної функції розподілу $g^{(2)}$, перепишемо її в кількох альтернативних представленнях. Вирази для величин $\rho^{(2)}$ та $g^{(2)}$ через функції K_j (див. рівняння (7)) набувають вигляду

$$\rho^{(2)} = \frac{K_2(T^*, \mu^*; \bar{y}_{\max}) - K_1(T^*, \mu^*; \bar{y}_{\max})}{v^2 K_0(T^*, \mu^*; \bar{y}_{\max})},$$

$$g^{(2)} = [K_2(T^*, \mu^*; \bar{y}_{\max}) - K_1(T^*, \mu^*; \bar{y}_{\max})] \times$$

$$\times \frac{K_0(T^*, \mu^*; \bar{y}_{\max})}{K_1(T^*, \mu^*; \bar{y}_{\max})^2}.$$
(20)

Також можна представити результати для парної функції розподілу у вигляді параметричних рівнянь. Застосовуючи ідею, взятую з роботи [18], введемо нову функцію

$$\bar{z}_{\max} = \bar{y}_{\max} + \frac{\mu^*}{T^*}$$
(21)

і виразимо хімічний потенціал як функцію двох змінних, T^* і $\bar{z}_{\max}$:

$$\mu^* = T^* \bar{z}_{\max} - \frac{\tilde{K}_1(T^*; \bar{z}_{\max})}{\tilde{K}_0(T^*; \bar{z}_{\max})},$$
(22)

де спеціальні функції $\tilde{K}_j$ визначаються виразом

$$\tilde{K}_j(T^*; \bar{z}_{\max}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n^j (v^* T^{*3/2})^n}{n!} \times$$

$$\times \exp\left(\bar{z}_{\max} n - \frac{a}{2T^*} n^2\right).$$
(23)

Тепер двочастинкова функція розподілу $\rho^{(2)}$ і парна функція розподілу $g^{(2)}$ набувають вигляду

$$\rho^{(2)} = \frac{\tilde{K}_2(T^*; \bar{z}_{\max}) - \tilde{K}_1(T^*; \bar{z}_{\max})}{v^2 \tilde{K}_0(T^*; \bar{z}_{\max})},$$
(24)

$$g^{(2)} = \frac{[\tilde{K}_2(T^*; \bar{z}_{\max}) - \tilde{K}_1(T^*; \bar{z}_{\max})] \tilde{K}_0(T^*; \bar{z}_{\max})}{\tilde{K}_1(T^*; \bar{z}_{\max})^2}.$$
(25)

За будь-якої заданої температури T^* , рівняння (25) і (22) можна формально розглядати як параметричне рівняння для парної функції розподілу $g^{(2)}$, що залежить від μ^* , а $\bar{z}_{\max}$ є параметром.

Аналогічно, якщо рівняння (12) переписати у вигляді

$$\rho^*(T^*; \bar{z}_{\max}) = \frac{\tilde{K}_1(T^*; \bar{z}_{\max})}{\tilde{K}_0(T^*; \bar{z}_{\max})},$$
(26)

тоді рівняння (25) і (26) утворюють параметричне рівняння для парної функції розподілу $g^{(2)}$ як функції від ρ^* для будь-якої заданої температури T^* , а $\bar{z}_{\max}$ є параметром.

На цьому етапі можна графічно проілюструвати отримані результати для парної функції розподілу. На рис. 1 показано залежність парної функції розподілу $g^{(2)}$ від $\bar{z}$ для двох різних значень температури: $T^* = 0,40$, що лежить вище діапазону критичних температур, і $T^* = 0,20$, що лежить нижче цього діапазону. Значення критичних температур наведено в таблиці. Для субкритичної температури $T^* = 0,20$ суцільні ділянки кривої, позначені жирною лінією, відповідають стабільним станам, а пунктирні – метастабільним або нестабільним станам.

На рис. 2 показано залежність парної функції розподілу $g^{(2)}$ від $\bar{y}$ для тих самих температур $T^* = 0,4$ і $0,2$. Позначення такі ж, як на рис. 1.

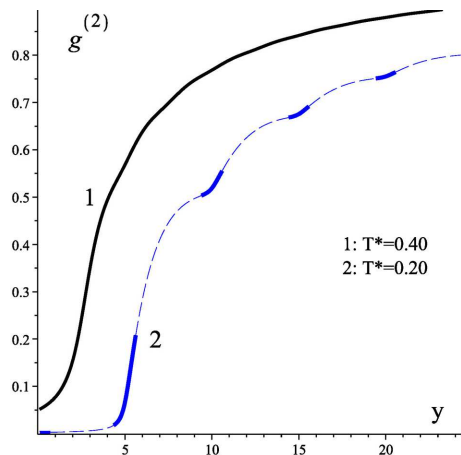


Рис. 2. Залежність парної функції розподілу $g^{(2)}$ від $\bar{y}$ для температур $T^* = 0,4$ (1, температура вища за $T_c^* \approx 0,25$) і $0,2$ (2, температура нижча за T_c^*). Ділянки на кривій, позначені жирними суцільними лініями 2 відповідають стабільним фазам, пунктирними лініями – метастабільним і нестабільним областям

Координати перших чотирьох критичних точок у моделі коміркового плинку з взаємодією Кюрі-Вейса. Чисельні розрахунки були виконані для значень $a = 1,2$ і $v^* = 5,0$

n	T_c^*	ρ_c^*	μ_c^*	$\bar{z}_c$
1	0,254567	0,513896	0,209380	2,84119
2	0,261881	1,50557	0,585097	7,98327
3	0,265254	2,50303	0,891843	12,7985
4	0,267242	3,50191	1,16893	17,4779

На рис. 3, *a* залежність парної функції розподілу $g^{(2)}$ від концентрації ρ^* показано для тих самих двох температур: надкритичної $T^* = 0,40$ і субкритичної $T^* = 0,20$. Видно, що $g^{(2)}$ є монотонно зростаючою функцією ρ^* за постійної температури. З графіка для субкритичної температури також можна зробити висновок, що парна функція розподілу набуває більших значень у кожній наступній фазі порівняно з попередньою. Крім того, на рис. 3, *b* показано парну функцію розподілу для дуже низької температури $T^* = 0,1$. У таких умовах ρ^* -інтервали стабільних фаз дуже вузькі й майже невидимі в масштабі графіка. Таким чином, представлена крива проходить через різні двофазні області й відповідає метастабільним і нестабільним станам.

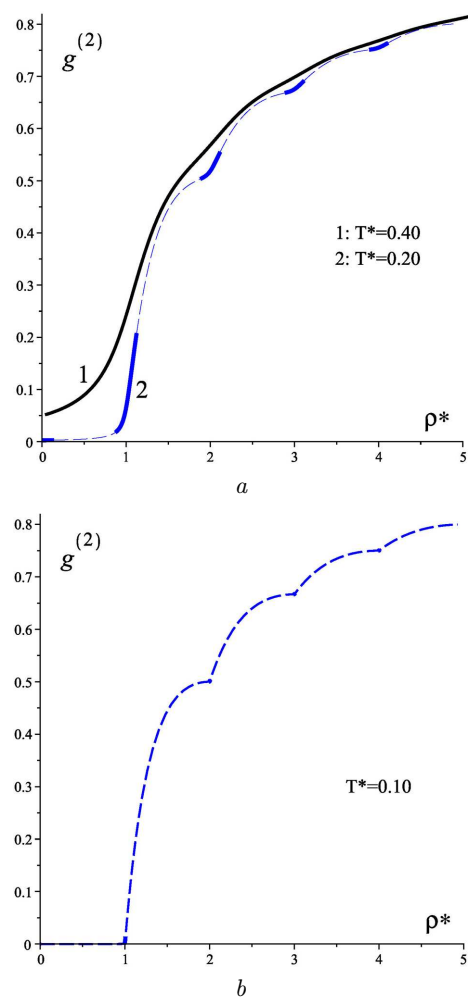


Рис. 3. Залежність парної функції розподілу $g^{(2)}$ від ρ^* для температур $T^* = 0,4$ (1, температура вища за $T_c^* \approx 0,25$) і $0,2$ (2, температура нижча за T_c^*) (а) і $0,1$ (температура набагато нижча за T_c^*) (б). Для температур, нижчих за критичну ділянки, позначені жирними суцільними лініями відповідають стабільним фазам, пунктирними лініями – метастабільним і нестабільним областям. На панелі (б) стабільні області занадто малі, щоб їх можна було помітити в даному масштабі

Залежність парної функції розподілу від хімічного потенціалу μ^* наведено на рис. 4. Її поведінка проілюстрована для двох температур, а саме $T^* = 0,40$ і $0,20$.

Просторову залежність $g^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ для моделі коміркового плинку з взаємодією Кюрі-Вейса можна представити у вигляді ступінчастої функції. Якщо $\mathbf{r}_1$ і $\mathbf{r}_2$ розташовані в межах однієї комірки, $g^{(2)}$ набуває значення, яке залежить від темпе-

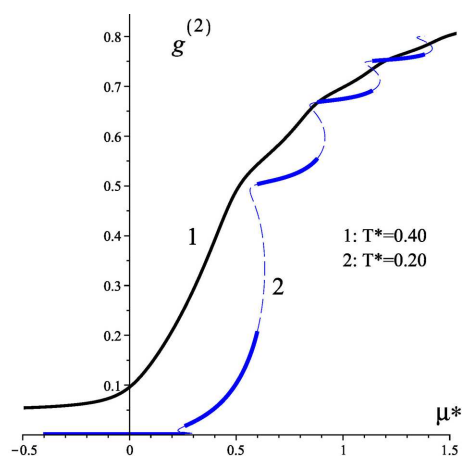


Рис. 4. Залежність парної функції розподілу $g^{(2)}$ від μ^* для температур $T^* = 0,4$ (1, температура вища за $T_c^* \approx 0,25$) і $0,2$ (2, температура нижча за T_c^*). Ділянки на кривій, позначені жирними суцільними лініями 2 відповідно мають стабільним фазам, пунктирні ділянки – метастабільним і нестабільним областям

ратури й хімічного потенціалу (або концентрації). Однак, як тільки координати двох частинок належать до різних комірок, $g^{(2)}$ стає рівною одиниці. На рис. 5, а така ступінчаста залежність проілюстрована для різних значень температури T^* і концентрації ρ^* . Ці значення вибрано відповідно до фази I, фази II, фази III і надкритичної області, що розташована над критичною точкою співіснування Фаз I і II. Оскільки значення для Фази I майже непомітне в масштабі графіка, на рис. 5, b у збільшеному масштабі показано поведінку $g^{(2)}$ у фазі I разом із границею низької концентрації (А.2) (див. Додаток А для отримання детальної інформації). За репрезентативний стан для фази I вибрано стан, що відповідає значенням $T^* = 0,2$ і $\rho^* = 0,1$. Для інших станів було вибрано такі значення: $T^* = 0,2$ і $\rho^* = 1,0$ для фази II; $T^* = 0,2$ і $\rho^* = 2,0$ для фази III, і $T^* = 0,5$ і $\rho^* = 0,5$ для надкритичного стану.

З отриманих результатів видно, що парна функція розподілу набуває значення, що відповідає ідеальному газу, як тільки дві частинки не містяться в одній комірці. Якщо дві частинки дійсно містяться в одній комірці, то значення $g^{(2)}$ стає меншим за 1, що вказує на те, що ймовірність перебування двох частинок на відстані r всередині комірки менша, ніж у випадку ідеального газу. Однак в іншому випадку парна функція розподілу не за-

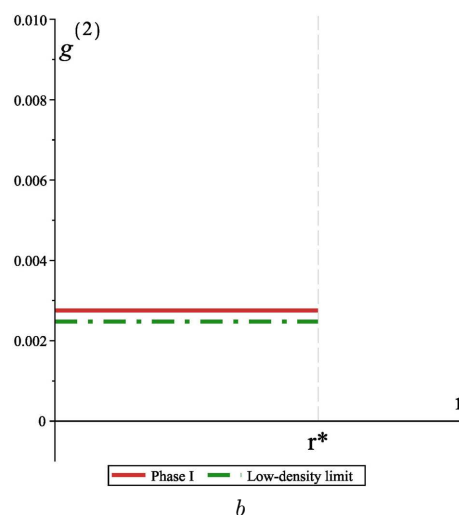
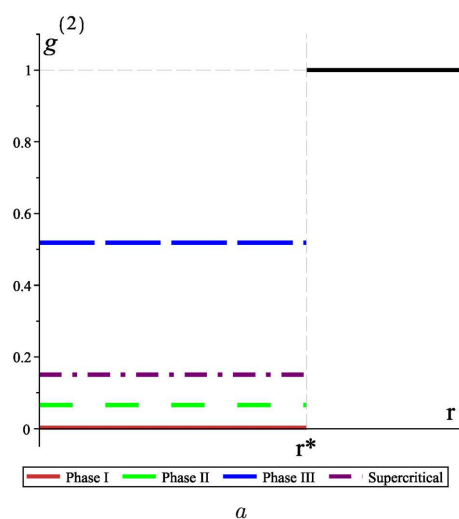


Рис. 5. Залежність парної функції розподілу $g^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ від відстані $r = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$. Величина r^* означає відстань від точки з координатою $\mathbf{r}_1$ до межі кубічної комірки, що містить $\mathbf{r}_1$, у напрямку $\mathbf{r}_2$. а – фаза I: $T^* = 0,2$; $\rho^* = 0,1$; фаза II: $T^* = 0,2$; $\rho^* = 1,0$; фаза III: $T_c^* = 0,2$; $\rho^* = 2,0$. Надкритична область: $T^* = 0,5$; $\rho^* = 0,5$. Коли $r > r^*$ маємо $g^{(2)} = 1$. б – фаза I: $T^* = 0,2$; $\rho^* = 0,1$. Границя низької концентрації: $g^{(2)} \approx \exp(-a/T^*)$, де $T^* = 0,2$; $a = 1,2$

лежить від r , і тому жодної структури не спостерігається навіть всередині комірки. Таким чином, модель плин у комірці з взаємодією Кюрі–Вейса є по суті плинном середнього поля.

Одна особливість, яку слід зазначити, полягає в тому, що парна функція розподілу $g^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ має розрив на межі комірки. Це нагадує поведінку парної функції розподілу для моделі проникних

сфер [2], де ця величина має розрив, коли $r = \sigma$, де σ – діаметр сфери. Варто також зазначити, що цей розрив є артефактом просторового огрублення в обох моделях.

4. Висновки

У статті отримано точні вирази для парної функції розподілу $g^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ у моделі коміркової плинку з взаємодією Кюри–Вейса. На основі отриманого аналітичного результату графічно проілюстровано залежності $g^{(2)}$ від відстані між частинками, їхньої концентрації та хімічного потенціалу. З аналізу просторової залежності зроблено висновок, що парна функція розподілу набуває значення, що відповідає ідеальному газу, щоразу, коли дві частинки займають різні комірки. Тільки якщо обидві частинки містяться в одній комірці, значення $g^{(2)}$ стає меншим за одиницю, що відображає знижену ймовірність перебування двох частинок на відстані r порівняно з ідеальним газом. Окрім цього, функція $g^{(2)}$ не залежить від міжчастинкової відстані r , і таким чином не виникає внутрішньо-коміркової структури. Отже, плин у комірці з взаємодією Кюри–Вейса є по суті плинком середнього поля. Із залежності $g^{(2)}$ від концентрації видно, що парна функція розподілу очікувано набуває більших значень у кожній наступній фазі порівняно з попередньою, оскільки вони характеризуються вищими концентраціями.

Ця робота була підтримана Національним фондом досліджень України в рамках проекту № 2023.03/0201.

ДОДАТОК А

Границя низької концентрації для парної функції розподілу

Для ізотропної системи парна функція розподілу $g^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ є функцією лише відстані $r \equiv |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$, а границя низької концентрації дорівнює фактору Больцмана $e(r)$ для потенціалу взаємодії пар $v(r)$ (див., наприклад, роботу [19, розділ 2.6]):

$$\lim_{\rho \rightarrow 0} g^{(2)}(r) = e(r) \equiv \exp(-\beta v(r)).$$

Припустимо, що у випадку коміркової моделі, яка досліджується в цій статті, також виконується умова

$$\lim_{\rho \rightarrow 0} g^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = e(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (\text{A.1})$$

де фактор Больцмана для взаємодії Кюри–Вейса, визначеної в рівнянні (3), дорівнює

$$e(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \exp[-\beta \Phi_{N_v}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)].$$

Якщо $\mathbf{r}_1$ і $\mathbf{r}_2$ перебувають у різних комірках, то

$$e(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \exp\left(\frac{\beta J_1}{N_v}\right) = \exp\left(\frac{\beta^*}{N_v}\right),$$

де $\beta^* = 1/T^*$. У границі $N_v \rightarrow \infty$,

$$e(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \approx 1 + \frac{\beta^*}{N_v} \approx 1.$$

Якщо $\mathbf{r}_1$ та $\mathbf{r}_2$ перебувають в одній комірці, то

$$e(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \exp\left(\frac{\beta J_1}{N_v} - \beta J_2\right) = \exp\left(\frac{\beta^*}{N_v} - \beta^* a\right).$$

У границі $N_v \rightarrow \infty$,

$$e(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \approx \exp(-\beta^* a).$$

Отже,

$$\begin{aligned} \lim_{\rho \rightarrow 0} g^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = & \begin{cases} \exp\left(\frac{\beta^*}{N_v} - \beta^* a\right), & \text{якщо } \exists \Delta_l(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \in \Delta_l), \\ \exp\left(\frac{\beta^*}{N_v}\right), & \text{якщо } \nexists \Delta_l(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \in \Delta_l). \end{cases} \end{aligned}$$

У термодинамічній границі $N_v \rightarrow \infty$ маємо

$$\begin{aligned} \lim_{\substack{\rho \rightarrow 0 \\ N_v \rightarrow \infty}} g^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = & \begin{cases} \exp(-\beta^* a), & \text{якщо } \exists \Delta_l(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \in \Delta_l), \\ 1, & \text{якщо } \nexists \Delta_l(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \in \Delta_l). \end{cases} \quad (\text{A.2}) \end{aligned}$$

Як видно з цього Додатка, член Кюри–Вейса дає внесок лише порядку $O\left(\frac{1}{N_v}\right)$ і тому зникає з $g^{(2)}$ та інших супутніх величин у термодинамічній границі.

1. C. Marquest, T.A. Witten. Simple cubic structure in copolymer mesophases. *J. Phys. France* **50**, 1267 (1989).
2. C.N. Likos, M. Watzlawek, H. Löwen. Freezing and clustering transitions for penetrable spheres. *Phys. Rev. E* **58**, 3135 (1998).
3. M. Schmidt. An ab initio density functional for penetrable spheres. *J. Phys.: Condens. Matter* **11**, 10163 (1999).
4. M.-J. Feraud, E. Lomba, L.L. Lee. A self-consistent integral equation study of the structure and thermodynamics of the penetrable sphere fluid. *J. Chem. Phys.* **112**, 810 (2000).
5. C.N. Likos. Effective interactions in soft condensed matter physics. *Phys. Rep.* **348**, 267 (2001).
6. F.H. Stillinger. Phase transitions in the Gaussian core system. *J. Chem. Phys.* **65**, 3968 (1976).
7. A. Lang, C.N. Likos, M. Watzlawek, H. Löwen. Fluid and solid phases of the Gaussian core model. *J. Phys.: Condens. Matter.* **12**, 5087 (2000).
8. A.A. Louis, P.G. Bolhuis, J.P. Hansen. Mean-field fluid behavior of the Gaussian core model. *Phys. Rev. E* **62**, 7961 (2000).
9. A.A. Louis, P.G. Bolhuis, J.P. Hansen, E.J. Meijer. Can polymer coils be modeled as “soft colloids”? *Phys. Rev. Lett.* **85**, 2522 (2000).

10. P.G. Bolhuis, A.A. Louis, J.P. Hansen, E.J. Meijer. Accurate effective pair potentials for polymer solutions. *J. Chem. Phys.* **114**, 4296 (2001).
11. S. Prestipino. Cluster phases of penetrable rods on a line. *Phys. Rev. E* **90**, 042306 (2014).
12. S. Prestipino, D. Gazzillo, N. Tasinato. Probing the existence of phase transitions in one-dimensional fluids of penetrable particles. *Phys. Rev. E* **92**, 022138 (2015).
13. R. Finken, J.-P. Hansen, A.A. Louis. Phase separation of a multiple occupancy lattice gas. *J. Phys. A* **37**, 577 (2004).
14. D. Frydel, Y. Levin. Soft-particle lattice gas in one dimension: One- and two-component cases. *Phys. Rev. E* **98**, 062123 (2018).
15. Yu. Kozitsky, M. Kozlovskii, O. Dobush. Phase transitions in a continuum Curie–Weiss system: A quantitative analysis. In: *Modern Problems of Molecular Physics*. Edited by L.A. Bulavin, A.V. Chalyi (Springer, 2018).
16. Yu.V. Kozitsky, M.P. Kozlovskii, O.A. Dobush. A phase transition in a Curie–Weiss system with binary interactions. *Condens. Matter Phys.* **23**, 23502 (2020).
17. R.V. Romanik, O.A. Dobush, M.P. Kozlovskii, I.V. Pylyuk, M.A. Shpot. A multiple occupancy cell fluid model with competing attraction and repulsion interactions. *J. Stat. Phys.* **193**, 14 (2026).
18. M.P. Kozlovskii, O.A. Dobush. Phase behavior of a cell model with Curie–Weiss interaction. *J. Mol. Liq.* **353**, 118843 (2022).
19. J.P. Hansen, I.R. McDonald. *Theory of Simple Liquids: with Applications to Soft Matter. 4th edition* (Academic Press, 2013).

Одержано 27.11.25.

Переклад українською О. Войтенка

*R.V. Romanik, O.A. Dobush,
M.P. Kozlovskii, I.V. Pylyuk, M.A. Shpot*

PAIR DISTRIBUTION FUNCTION OF A CELL FLUID MODEL WITH CURIE–WEISS INTERACTION

In this paper we present results for the pair distribution function for the cell fluid model with Curie–Weiss interaction. As a supplementary result, one- and two-particle densities are calculated. The results confirm that the cell fluid model with Curie–Weiss interaction is essentially a mean-field fluid.

Keywords: cell fluid model, Curie–Weiss interaction, pair distribution function, n -particle density.