

МЕТОД ВЫЧИСЛЕНИЯ ПАРНЫХ ФУНКЦИЙ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК СИСТЕМЫ ЧАСТИЦ С ПОТЕНЦИАЛОМ ГАУССА

Ноговицын Е.А., Пронькин А.М.¹

Институт химии растворов РАН, Россия, 153045, г. Иваново,
ул. Академическая, д. 1, тел.: (4932)336259, E-mail: nogovits@ivanovo.ac.ru

¹ГОУ ВПО Ивановская медицинская академия Росздрава, Россия, 153462, г. Иваново,
пр. Ф.Энгельса, д.8, Тел.: (4932)417794, E-mail: pam@isma.ivanovo.ru

Компьютерное и аналитическое исследование сложных жидких систем – растворов полимеров, сополимеров, коллоидных систем и т.д. стало возможным благодаря развитию методов квантовой теории поля и физики высоких энергий. В основе теоретико-полевого подхода лежит представление статистической суммы и функций распределения в виде функциональных интегралов, когда интегрирование по координатам атомов и молекул заменяется интегрированием по одному или нескольким «флуктуирующим химическим потенциальным полям» [1].

В работе представлен метод вычисления функций радиального распределения (ФРР) и термодинамических функций (ТДФ), который основан на функциональном интегрировании в Гауссовом эквивалентном представлении (ГЭП) [2].

В рамках метода гауссова эквивалентного представления исследована система классических частиц с потенциалом Гаусса:

$$V(R) = V_0 e^{-(R/l)^2}$$

Такую систему можно рассматривать как простейшую модель растворов полимеров.

Показано, что рассчитанные в рамках ГЭП ФРР при определенных параметрах, соответствующих модели растворов полимеров, а также, зависимости средней потенциальной энергии на одну частицу от плотности, хорошо согласуются с результатами компьютерного эксперимента методом молекулярной динамики.

Метод ГЭП для вычисления функциональных интегралов не сводится к разложениям ни по плотности, ни по температуре, и является удобной регулярной вычислительной процедурой, не требующей больших вычислительных затрат для получения структурных и термодинамических характеристик сложных жидких систем.

Литература.

1. *Baeurle S.A.* Method of Gaussian Equivalent Representation: A New Technique for Reducing the Sign Problem of Functional Integral Method // *Phys. Rev. Lett.* 2002. Vol. 89. № 8. p. 080602-1-080602-4.
2. *Efimov G.V., Nogovitsin E.A.* The partition functions of classical systems in the Gaussian equivalent representation of functions integrals// *Physica.* 1996. Vol. A234. P. 506-522.