

Уланов Павел 104М

Дополнение к реферату по лекции 9.

1) Бридж функция  $E(r/v)$  можно заменить функцией  $E_{HS}(r/v)$ , которая соответствует модели твердых сфер:

$$E_{HS}(r, \eta) = c_{HS}(r) - g_{HS}(r) + 1 + \ln(y_{HS}(r)),$$

$$y_{HS}(r) = e^{\beta v_{HS}(r)} g_{HS}(r)$$

Вариационный принцип для свободной энергии (минимум) приводит к уравнению:

$$\int d^3 [g(r) - g_{HS}(r)] \frac{dE_{HS}}{d\eta} = 0$$

2) На рисунке 8 ( Fig. 8) авторы использовали данные для  $g(r)$  натрия при  $100^\circ\text{C}$ , полученные другими авторами. На основе этих данных был построен парный потенциал для натрия в нулевом приближении. Сравнение было по усредненному результату от 2-ой и 6-ой итерации. Можно наблюдать сходимость к полученному ранее контуру, что свидетельствует близость этого контура к истинному.

Также видно явное отличие от формы потенциала Леннарда – Джонса: имеется несколько экстремумов («колебательно затухающий характер») с увеличением  $r$ , в отличие от потенциала Л-Д.