

Препринти Інституту фізики конденсованих систем НАН України розповсюджуються серед наукових та інформаційних установ. Вони також доступні по електронній комп'ютерній мережі на WWW-сервері інституту за адресою <http://www.icmp.lviv.ua/>

The preprints of the Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine are distributed to scientific and informational institutions. They also are available by computer network from Institute's WWW server (<http://www.icmp.lviv.ua/>)

Євген Миколайович Сов'як  
Мирослав Федорович Головка  
Іван Ярославович Кравців

ПАРНА ТА УНАРНА КОРЕЛЯЦІЙНІ ФУНКЦІЇ ПРОСТОРОВО  
ОБМЕЖЕНОГО ФЛЮЇДУ В НЕМАТИЧНІЙ ФАЗІ

Роботу отримано 10 лютого 2010 р.

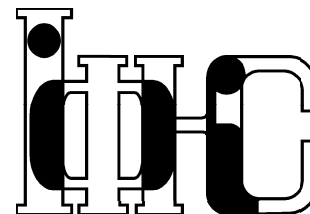
Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку відділом теорії розчинів

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені

Національна академія наук України



ІНСТИТУТ  
ФІЗИКИ  
КОНДЕНСОВАНИХ  
СИСТЕМ

ICMP-10-03U

Є.М.Сов'як, М.Ф.Головка, І.Я.Кравців

ПАРНА ТА УНАРНА КОРЕЛЯЦІЙНІ ФУНКЦІЇ  
ПРОСТОРОВО ОБМЕЖЕНОГО ФЛЮЇДУ  
В НЕМАТИЧНІЙ ФАЗІ

ЛЬВІВ

УДК: 536; 536.77; 538.91; 538.97

PACS: 05.20.Jj, 05.70.Np, 61.20.-p, 68.03.-g

### Парна та унарна кореляційні функції просторово обмеженого флюїду в нематичній фазі

Є.М.Сов'як, М.Ф.Головко, І.Я.Кравців

**Анотація.** На прикладі нематика розглянуто анізотропний флюїд точкових частинок, обмежених твердою стінкою. На основі розв'язку просторово неоднорідного рівняння Орнштейна-Церніке, для цієї моделі отримано аналітичні вирази для парної та унарної кореляційних функцій.

### Pair and singlet correlation functions of a spatially confined fluid in the nematic phase

E.M.Soviak, M.F.Holovko, I.Y.Kravtsiv

**Abstract.** For the nematic case, we consider an anisotropic fluid of point particles confined by a hard wall. By solving the spatially non-uniform Ornstein-Zernike equation, we obtain analytical expressions for the pair and singlet correlation functions of such a model.

Подається в Condensed Matter Physics  
Submitted to Condensed Matter Physics

© Інститут фізики конденсованих систем 2010  
Institute for Condensed Matter Physics 2010

### Вступ

Дослідження структури міжфазної області є однією з актуальних задач фізики конденсованих систем. Наявність поверхні розділу фаз значно ускладнює опис систем взаємодіючих частинок внаслідок просторової неоднорідності міжфазної області. Одним із найпростіших методів опису флюїдів при наявності поверхні розділу є метод Гендерсона-Абрагама-Баркера [1,2], в рамках якого опис флюїду зводиться до опису суміші, одним із сортів якої є тверді сфери з безмежно великими розмірами і з густиною рівною нулю. В результаті опис профіля густини зводиться до розв'язку інтегрального рівняння типу Орнштейна-Церніке для функції розподілу "частинка флюїду - поверхня" на основі відомої парної кореляційної функції флюїду за відсутності поверхні. Застосування цього підходу дало змогу достатньо коректно описати вплив короткосяжних взаємодій на структуру приповерхневого шару, врахувати вплив зовнішніх полів та взаємодії частинок з поверхнею. Однак цей підхід у найпростіших наближеннях, типу середньо-сферичного наближення, жодним чином не описує впливу далекосяжних міжчастинкових взаємодій на структуру міжфазної області. Більш продуктивним для врахування цих ефектів виявився метод просторово неоднорідних інтегральних рівнянь для парних кореляційних функцій, що включає в згортці і профіль густини частинок. Використання, наприклад, простої форми профіля густини у вигляді сходинки забезпечує коректний опис іонних систем у міжфазній області [3, 4]. Отримані при цьому вирази для профілів густини задовільняють точному співвідношенню, відомому під назвою контактної теореми [5,6]. Аналогічні результати нещодавно були отримані також для просторово обмеженої системи частинок з потенціалом взаємодії у формі потенціалу Юкави [7].

За останні роки значні зусилля були направлені на дослідження приповерхневих властивостей анізотропних флюїдів, зокрема нематичних рідких кристалів. У роботах [8,9], базуючись на отриманих в [10] аналітичних виразах для парних кореляційних функцій нематичного флюїду за відсутності поверхні розділу, в рамках методу Гендерсона-Абрагама-Баркера в середньо-сферичному наближенні були отримані аналітичні вирази для унарної функції розподілу нематика та на їх основі проведено дослідження структури міжфазної області в залежності від характеру взаємодії молекул нематика з поверхнею розділу. Однак, як і для ізотропних флюїдів, метод Гендерсона-Абрагама-Баркера в середньо-сферичному наближенні не дав змоги врахувати та дослідити вплив міжмолекулярних

взаємодій на структуру та властивості міжфазної області. Розв'язанню цієї проблеми присвячена дана робота. В ній, узагальнюючи викладену раніше в роботах [7, 11] методику, буде представлено розв'язок просторово неоднорідного рівняння Орнштейна-Церніке, на основі якого будуть отримані та проаналізовані аналітичні вирази для парної та унарної кореляційних функцій просторово обмеженого флюїду в нематичній фазі.

## 1. Постановка задачі

Розглянемо просторово обмежену твердою стінкою систему частинок з анізотропною взаємодією. Нехай межа стінки співпадає з площиною  $z = 0$ , а система знаходиться у верхній частині простору ( $z > 0$ ). Допустимо, що виділений напрям взаємодії  $\vec{n}$  паралельний осі  $Oz$  декартової системи координат. Аналогічно як і в [10], потенціал взаємодії між двома частинками, розташування яких задається радіусами-векторами  $\vec{R}_1$  та  $\vec{R}_2$  декартової системи координат, представимо у вигляді суми близькосяжного потенціалу  $u^{sh}(R_{12})$ , далекосяжного ізотропного потенціалу

$$\Phi_0(R_{12}) = A_0 \frac{1}{R_{12}} \exp(-\alpha_0 R_{12}) \quad (1.1)$$

та далекосяжного анізотропного потенціалу

$$\Phi_2(R_{12}, \Omega_1, \Omega_2) = A_2 \frac{1}{R_{12}} \exp(-\alpha_2 R_{12}) P_2(\cos \theta_{12}) \quad , \quad (1.2)$$

де:  $\vec{R}_{12} = |\vec{R}_1 - \vec{R}_2|$  – віддаль між частинками,  $\sigma$  – діаметр взаємодії твердої сфери, константи інтенсивності взаємодії  $A_0$ ,  $A_2$  і константи загасання взаємодії  $\alpha_0$ ,  $\alpha_2$  відповідно визначають ізотропну та анізотропну частини далекосяжної складової потенціалу,  $P_2(\cos \theta_{12})$  – другий поліном Лежандра, а  $\theta_{12}$  – кут відносної орієнтації частинок,  $\Omega = \{\theta, \varphi\}$  – кути орієнтації частинки відносно директора.

Парна кореляційна функція системи  $h(\vec{R}_1, \vec{R}_2, \Omega_1, \Omega_2)$ , пряма кореляційна  $c(\vec{R}_1, \vec{R}_2, \Omega_1, \Omega_2)$  і профіль густини числа частинок  $\rho(\vec{R}_1, \Omega_1)$  задовольняють просторово неоднорідне рівняння Орнштейна-Церніке для нематиків

$$h(\vec{R}_1, \vec{R}_2, \Omega_1, \Omega_2) = c(\vec{R}_1, \vec{R}_2, \Omega_1, \Omega_2) + \int d\vec{R}_3 d\Omega_3 \rho(\vec{R}_3, \Omega_3) c(\vec{R}_1, \vec{R}_3, \Omega_1, \Omega_3) h(\vec{R}_3, \vec{R}_2, \Omega_3, \Omega_2). \quad (1.3)$$

Розв'язок рівняння Орнштейна-Церніке у просторово неоднорідному випадку при врахуванні близькосяжних взаємодій являє собою складну математичну задачу. Оскільки рівняння фактично містить три невідомі функції, необхідно вибирати певні наближення для прямої кореляційної функції і включати у розгляд додаткове рівняння для визначення профілю густини частинок (наприклад, перше із рівнянь ланцюжка Боголюбова). Однак в області малих густин роль близькосяжної складової взаємодії є незначною, а основну роль в поведінці структурних і термодинамічних властивостей відіграють далекосяжні взаємодії. Врахування лише далекосяжних взаємодій і нехтування впливом розмірів частинок дозволяє при певних наближеннях для профілю густини частинок отримати аналітичні розв'язки рівняння Орнштейна-Церніке.

Рівняння (1.3) розв'язуватимемо у середньо-сферичному наближенні

$$\begin{aligned} h(R_{12}, \Omega_1, \Omega_2) &= -1, & R_{12} < \sigma, \\ c(R_{12}, \Omega_1, \Omega_2) &= -\frac{1}{T} \Phi_0(R_{12}) - \frac{1}{T} \Phi_2(R_{12}, \Omega_1, \Omega_2), & R_{12} > \sigma, \end{aligned} \quad (1.4)$$

яке у випадку точкових частинок визначає пряму кореляційну функцію у всьому просторі

$$c(R_{12}, \Omega_1, \Omega_2) = -\frac{1}{T} \Phi_0(R_{12}) - \frac{1}{T} \Phi_2(R_{12}, \Omega_1, \Omega_2), \quad (1.5)$$

а для профілю густини системи виберемо орієнтаційно залежне сходящеве наближення

$$\rho(\vec{R}_1, \Omega_1) = \begin{cases} \rho f(\Omega_1), & z_1 > 0, \\ 0, & z_1 < 0, \end{cases} \quad (1.6)$$

де:  $T$  – абсолютна температура системи, вимірювана в енергетичних одиницях,  $\rho$  – густина числа частинок системи далеко від обмежувальної поверхні,  $f(\Omega_1)$  – орієнтаційно залежна частина профілю густини, зумовлена анізотропією системи. Останню у випадку нормальних нематиків можна записати у вигляді розвинення за сферичними функціями  $Y_{lm}(\Omega)$

$$f(\Omega) = \frac{1}{Z_\Omega} \exp \left\{ \sum_{l>0} b_l Y_{l0}(\Omega) \right\}, \quad (1.7)$$

де  $Z_\Omega$  – нормуючий множник, вибраний таким чином що

$$\int f(\Omega) d\Omega = 1 \quad (1.8)$$

Обмежуючись в (1.7) доданком з  $l = 2$ , приходимо до моделі Майера-Заупе [12, 13], в рамках якої

$$f(\Omega) = f(\theta) = \frac{1}{4\pi Z} e^{m \cos^2 \theta} \quad (1.9)$$

де нормуючий множник

$$Z = \int_0^1 e^{mx^2} dx \quad (1.10)$$

може бути виражений через функцію помилок від уявного аргумента. При цьому параметр порядку визначається з рівняння

$$\begin{aligned} S &= 4\pi \int_0^1 P_2(\cos \theta) f(\theta) d \cos \theta = 4\pi \int_0^1 \frac{3 \cos^2 \theta - 1}{2} f(\theta) d \cos \theta \\ &= -\frac{1}{2} + \frac{3}{2Z} \int_0^1 x^2 e^{mx^2} dx = -\frac{1}{2} + \frac{3}{2} \frac{\partial \ln Z}{\partial m}. \end{aligned} \quad (1.11)$$

Визначений з рівнянь (1.10-1.11) параметр  $S$  рівний нулю для малих  $m$ , а з ростом  $m$  зростає, прямуючи до одиниці. Типова залежність  $S(m)$  представлена на рис. 1.

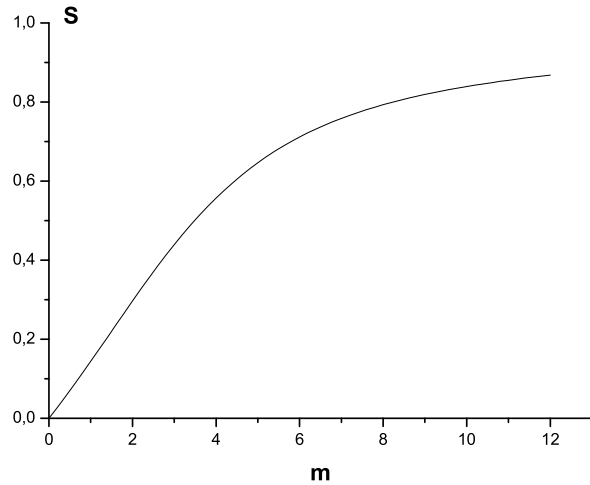


Рис.1. Залежність параметра порядку  $S$  від параметра  $m$ .

## 2. Розв'язок рівнянь для гармонік парної кореляційної функції

Оскільки пряма кореляційна функція у середньо-сферичному наближенні не залежить від орієнтації вектора  $\vec{R}_{12}$  взаємного розташування частинок у просторі, то можна допустити, що і парна кореляційна функція володіє такою ж властивістю. Враховуючи вигляд далекосяжної складової потенціалу взаємодії, пряму та парну кореляційні функції можна записати у вигляді:

$$\begin{aligned} c(R_{12}, \Omega_1, \Omega_2) &= c_{000}(R_{12}) + c_{020}(R_{12})Y_{20}(\Omega_1) + c_{200}(R_{12})Y_{20}(\Omega_2) \\ &\quad + \sum_{\mu} c_{22\mu}(R_{12})Y_{2\mu}(\Omega_1)Y_{2\mu}^*(\Omega_2), \\ h(R_{12}, \Omega_1, \Omega_2) &= h_{000}(R_{12}) + h_{020}(R_{12})Y_{20}(\Omega_1) + h_{200}(R_{12})Y_{20}(\Omega_2) \\ &\quad + \sum_{\mu} h_{22\mu}(R_{12})Y_{2\mu}(\Omega_1)Y_{2\mu}^*(\Omega_2). \end{aligned} \quad (2.1)$$

Підставимо вирази (2.1) у рівняння Орнштейна-Церніке (1.3) і виконаємо інтегрування за орієнтаціями. Завдяки аксіальній симетрії нематиків і залежності (1.7) від орієнтації для гармонік парної кореляційної функції отримаємо наступні рівняння для  $\mu \neq 0$

$$h_{22\mu}(\vec{R}_1, \vec{R}_2) = c_{22\mu}(R_{12}) + \left\langle |Y_{2\mu}(\Omega)|^2 \right\rangle_{\Omega} \int_V d\vec{R}_3 \rho(\vec{R}_3) c_{22\mu}(R_{13}) h_{22\mu}(\vec{R}_3, \vec{R}_2) \quad (2.2)$$

та для  $\mu = 0$

$$\begin{aligned} h_{000}(\vec{R}_1, \vec{R}_2) &= c_{000}(R_{12}) + \int_V d\vec{R}_3 \rho(\vec{R}_3) c_{000}(R_{13}) h_{000}(\vec{R}_3, \vec{R}_2) + \\ &\quad \left\langle |Y_{20}(\Omega)| \right\rangle_{\Omega} \int_V d\vec{R}_3 \rho(\vec{R}_3) c_{020}(R_{13}) h_{000}(\vec{R}_3, \vec{R}_2) + \\ &\quad \left\langle |Y_{20}(\Omega)| \right\rangle_{\Omega} \int_V d\vec{R}_3 \rho(\vec{R}_3) c_{000}(R_{13}) h_{200}(\vec{R}_3, \vec{R}_2) + \\ &\quad \left\langle |Y_{20}(\Omega)|^2 \right\rangle_{\Omega} \int_V d\vec{R}_3 \rho(\vec{R}_3) c_{020}(R_{13}) h_{200}(\vec{R}_3, \vec{R}_2), \end{aligned} \quad (2.3)$$

$$\begin{aligned}
h_{200}(\vec{R}_1, \vec{R}_2) &= c_{200}(R_{12}) + \int_V d\vec{R}_3 \rho(\vec{R}_3) c_{200}(R_{13}) h_{000}(\vec{R}_3, \vec{R}_2) + \\
&\langle |Y_{20}(\Omega)| \rangle_\Omega \int_V d\vec{R}_3 \rho(\vec{R}_3) c_{220}(R_{13}) h_{000}(\vec{R}_3, \vec{R}_2) + \\
&\langle |Y_{20}(\Omega)| \rangle_\Omega \int_V d\vec{R}_3 \rho(\vec{R}_3) c_{200}(R_{13}) h_{200}(\vec{R}_3, \vec{R}_2) + \\
&\left\langle |Y_{20}(\Omega)|^2 \right\rangle_\Omega \int_V d\vec{R}_3 \rho(\vec{R}_3) c_{220}(R_{13}) h_{200}(R_{32}),
\end{aligned} \tag{2.4}$$

$$\begin{aligned}
h_{020}(\vec{R}_3, \vec{R}_2) &= c_{020}(R_{12}) + \int_V d\vec{R}_3 \rho(\vec{R}_3) c_{000}(R_{13}) h_{020}(\vec{R}_3, \vec{R}_2) + \\
&\langle |Y_{20}(\Omega)| \rangle_\Omega \int_V d\vec{R}_3 \rho(\vec{R}_3) c_{020}(R_{13}) h_{020}(\vec{R}_3, \vec{R}_2) + \\
&\langle |Y_{20}(\Omega)| \rangle_\Omega \int_V d\vec{R}_3 \rho(\vec{R}_3) c_{000}(R_{13}) h_{220}(\vec{R}_3, \vec{R}_2) + \\
&\left\langle |Y_{20}(\Omega)|^2 \right\rangle_\Omega \int_V d\vec{R}_3 \rho(\vec{R}_3) c_{020}(R_{13}) h_{220}(\vec{R}_3, \vec{R}_2),
\end{aligned} \tag{2.5}$$

$$\begin{aligned}
h_{220}(\vec{R}_3, \vec{R}_2) &= c_{220}(R_{12}) + \int_V d\vec{R}_3 \rho(\vec{R}_3) c_{200}(R_{13}) h_{020}(R_{32}) + \\
&\langle |Y_{20}(\Omega)| \rangle_\Omega \int_V d\vec{R}_3 \rho(\vec{R}_3) c_{220}(R_{13}) h_{020}(\vec{R}_3, \vec{R}_2) + \\
&\langle |Y_{20}(\Omega)| \rangle_\Omega \int_V d\vec{R}_3 \rho(\vec{R}_3) c_{200}(R_{13}) h_{220}(\vec{R}_3, \vec{R}_2) + \\
&\left\langle |Y_{20}(\Omega)|^2 \right\rangle_\Omega \int_V d\vec{R}_3 \rho(\vec{R}_3) c_{220}(R_{13}) h_{220}(\vec{R}_3, \vec{R}_2).
\end{aligned} \tag{2.6}$$

де:  $\langle \dots \rangle_\Omega = \int d\Omega f(\Omega) \dots$  – позначає усереднення за орієнтацією з ваговою функцією  $f(\Omega)$ .

Система рівнянь (2.3)-(2.6) є системою інтегральних рівнянь Орнштейна-Церніке для орієнтаційних гармонік парної кореляційної функції. Вона справедлива як для просторово однорідного так і для просторово неоднорідного випадків. У першому випадку слід покласти  $\rho(R) = \rho$ . У просторово неоднорідному випадку  $\rho(R) = \rho$  для  $z > 0$  і  $\rho(R) = 0$  для  $z < 0$ . Слід відмітити, що пари рівняння (2.3)-(2.4) та (2.5)-(2.6) є незалежними.

Для кращого розуміння результатів просторово неоднорідного випадку розглянемо спершу просторово однорідний випадок.

### 2.1. Просторово-однорідний випадок

У просторово однорідному випадку

$$h_{lm\mu}(\vec{R}_1, \vec{R}_2) = h_{lm\mu}(R_{12}) \tag{2.7}$$

Підставимо (2.7) у систему рівнянь (2.3)–(2.6) та врахуємо, що у випадку точкових частинок завдяки вигляду далекосяжної складової потенціалу парної взаємодії (1.1), (1.2) деякі гармоніки відсутні

$$c_{020}(R_{12}) = 0, \quad c_{200}(R_{12}) = 0. \tag{2.8}$$

Тоді для гармонік отримаємо наступні рівняння для  $\mu \neq 0$

$$h_{22\mu}(R_{12}) = c_{22\mu}(R_{12}) + \rho \left\langle |Y_{2\mu}(\Omega)|^2 \right\rangle_\Omega \int_V d\vec{R}_3 c_{22\mu}(R_{13}) h_{22\mu}(R_{32}) \tag{2.9}$$

та для  $\mu = 0$

$$\begin{aligned}
h_{000}(R_{12}) &= c_{000}(R_{12}) + \rho \int_V d\vec{R}_3 c_{000}(R_{13}) h_{000}(R_{32}) \\
&+ \rho \langle |Y_{20}(\Omega)| \rangle_\Omega \int_V d\vec{R}_3 c_{000}(R_{13}) h_{200}(R_{32}),
\end{aligned} \tag{2.10}$$

$$\begin{aligned}
h_{200}(R_{12}) &= \rho \langle |Y_{20}(\Omega)| \rangle_\Omega \int_V d\vec{R}_3 c_{220}(R_{13}) h_{000}(R_{32}) \\
&+ \rho \left\langle |Y_{20}(\Omega)|^2 \right\rangle_\Omega \int_V d\vec{R}_3 c_{220}(R_{13}) h_{200}(R_{32}),
\end{aligned} \tag{2.11}$$

$$\begin{aligned}
h_{020}(R_{32}) &= \rho \int_V d\vec{R}_3 c_{000}(R_{13}) h_{020}(R_{32}) \\
&+ \rho \langle |Y_{20}(\Omega)| \rangle_\Omega \int_V d\vec{R}_3 c_{000}(R_{13}) h_{220}(R_{32}),
\end{aligned} \tag{2.12}$$

$$\begin{aligned}
h_{220}(R_{32}) &= c_{220}(R_{12}) + \rho \langle |Y_{20}(\Omega)| \rangle_\Omega \int_V d\vec{R}_3 c_{220}(R_{13}) h_{020}(R_{32}) \\
&+ \rho \left\langle |Y_{20}(\Omega)|^2 \right\rangle_\Omega \int_V d\vec{R}_3 c_{220}(R_{13}) h_{220}(R_{32}).
\end{aligned} \tag{2.13}$$

Здійснимо перетворення Фур'є системи рівнянь (2.10)-(2.13). Для  $\mu \neq 0$  маємо рівняння:

$$\tilde{h}_{22\mu}(k) = \tilde{c}_{22\mu}(k) + \rho \overline{Y_{2\mu}^2} \tilde{c}_{22\mu}(k) \tilde{h}_{22\mu}(k) \tag{2.14}$$

а для  $\mu = 0$  отримаємо наступні незалежні системи рівнянь:

$$\begin{cases} \tilde{h}_{000}(k) = \tilde{c}_{000}(k) + \rho \tilde{c}_{000}(k) \tilde{h}_{000}(k) + \rho \bar{Y}_{20} \tilde{c}_{000}(k) \tilde{h}_{200}(k) \\ \tilde{h}_{200}(k) = \rho \bar{Y}_{20} \tilde{c}_{220}(k) \tilde{h}_{000}(k) + \rho \bar{Y}_{20}^2 \tilde{c}_{220}(k) \tilde{h}_{200}(k) \end{cases} \quad (2.15)$$

$$\begin{cases} \tilde{h}_{020}(k) = \rho \tilde{c}_{000}(k) \tilde{h}_{020}(k) + \rho \bar{Y}_{20} \tilde{c}_{000}(k) \tilde{h}_{220}(k) \\ \tilde{h}_{220}(k) = \tilde{c}_{220}(k) + \rho \bar{Y}_{20} \tilde{c}_{220}(k) \tilde{h}_{020}(k) + \rho \bar{Y}_{20}^2 \tilde{c}_{220}(k) \tilde{h}_{220}(k) \end{cases} \quad (2.16)$$

де ми ввели позначення

$$\bar{Y}_{20} = \langle |Y_{20}(\Omega)| \rangle_{\Omega}, \quad \bar{Y}_{2\mu}^2 = \langle |Y_{2\mu}^2(\Omega)| \rangle_{\Omega}. \quad (2.17)$$

При цьому

$$\bar{Y}_{20} = S \sqrt{\frac{5}{4\pi}}, \quad (2.18)$$

де  $S$  визначається з рівняння (1.11). Функції  $\tilde{c}_{000}(k)$ ,  $\tilde{c}_{220}(k)$  є Фур'є-образами гармонік прямої кореляційної функції:

$$\tilde{c}_{000}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{R} e^{i\vec{k}\vec{R}} c_{000}(R) = -4\pi \frac{A_0}{T} \frac{1}{k^2 + \alpha_0^2}, \quad (2.19)$$

$$\tilde{c}_{220}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{R} e^{i\vec{k}\vec{R}} c_{220}(R) = -4\pi \frac{A_2}{T} \frac{1}{k^2 + \alpha_2^2}, \quad (2.20)$$

Розв'язуючи системи (2.15)–(2.16) і враховуючи (2.19) та (2.20), отримаємо вирази для гармонік парної кореляційної функції у Фур'є-просторі:

$$\tilde{h}_{000}(k) = -\frac{\kappa_0^2}{\rho} \frac{k^2 + \tilde{\kappa}_2^2}{k^4 + (\tilde{\kappa}_0^2 + \tilde{\kappa}_2^2)k^2 + \tilde{\kappa}_0^2 \tilde{\kappa}_2^2 - \kappa_0^2 \kappa_2^2 (\bar{Y}_{20})^2}, \quad (2.21)$$

$$\tilde{h}_{020}(k) = \tilde{h}_{200}(k) = \frac{(\bar{Y}_{20} \kappa_0^2 \kappa_2^2) / \rho}{k^4 + (\tilde{\kappa}_0^2 + \tilde{\kappa}_2^2)k^2 + \tilde{\kappa}_0^2 \tilde{\kappa}_2^2 - \kappa_0^2 \kappa_2^2 (\bar{Y}_{20})^2}, \quad (2.22)$$

$$\tilde{h}_{220}(k) = -\frac{\kappa_2^2}{\rho} \frac{k^2 + \tilde{\kappa}_0^2}{k^4 + (\tilde{\kappa}_0^2 + \tilde{\kappa}_2^2)k^2 + \tilde{\kappa}_0^2 \tilde{\kappa}_2^2 - \kappa_0^2 \kappa_2^2 (\bar{Y}_{20})^2}, \quad (2.23)$$

де для скорочення запису ми ввели позначення

$$\begin{aligned} \tilde{\kappa}_0^2 &= \kappa_0^2 + \alpha_0^2, & \kappa_0^2 &= 4\pi \frac{A_0}{T} \rho, \\ \tilde{\kappa}_2^2 &= \bar{Y}_{20}^2 \kappa_2^2 + \alpha_2^2, & \kappa_2^2 &= 4\pi \frac{A_2}{T} \rho, \end{aligned} \quad (2.24)$$

Як видно, у знаменниках виразів (2.21)–(2.23) виникає доданок  $\kappa_0^2 \kappa_2^2 [\bar{Y}_{20}^2 - (\bar{Y}_{20})^2]$ , який містить середньоквадратичну флуктуацію величини  $P_2(\cos \theta)$  оскільки

$$\bar{Y}_{20}^2 - (\bar{Y}_{20})^2 = \frac{5}{4\pi} \langle (\Delta P_2(\cos \theta))^2 \rangle, \quad (2.25)$$

де

$$\begin{aligned} \langle (\Delta P_2(\cos \theta))^2 \rangle &= \langle P_2^2(\cos \theta) \rangle - \langle P_2(\cos \theta) \rangle^2 \\ &= 4\pi \int_0^1 P_2^2(\cos \theta) f(\theta) d \cos \theta - S^2 \\ &= 4\pi \int_0^1 \frac{1}{4} (3 \cos^2 \theta - 1)^2 f(\theta) d \cos \theta - S^2 \end{aligned} \quad (2.26)$$

Графік залежності величини  $\langle (\Delta P_2(\cos \theta))^2 \rangle$  від  $m$  подано на рис.2.

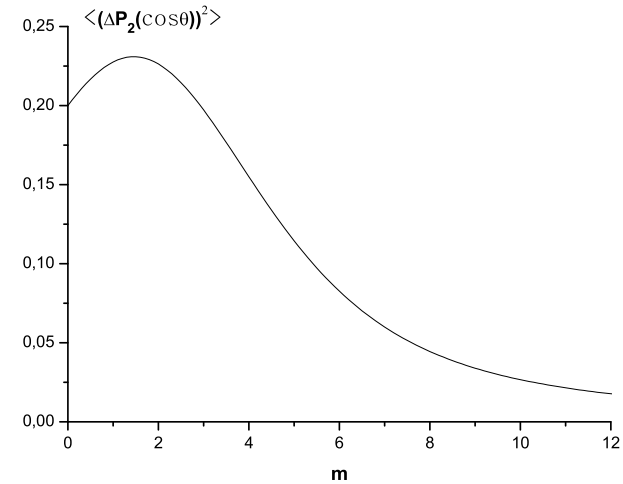


Рис.2. Залежність флуктуації  $\langle (\Delta P_2(\cos \theta))^2 \rangle$  від  $m$ .

При  $m = 0$ ,  $S = 0$  і

$$\langle (\Delta P_2(\cos \theta))^2 \rangle = \int_0^1 P_2^2(\cos \theta) d \cos \theta = \frac{1}{5} \quad (2.27)$$

З ростом  $m$  величина  $\langle (\Delta P_2(\cos \theta))^2 \rangle$  зростає, досягаючи максимального значення  $\langle (\Delta P_2(\cos \theta))^2 \rangle = 0.23$  при  $m = 1.5$ . При подальшому зростанні  $m$  флуктуація  $\langle (\Delta P_2(\cos \theta))^2 \rangle$  прямує до нуля.

Знаменник у виразах (2.21)–(2.23) перепишемо таким чином:

$$k^4 + (\tilde{\kappa}_0^2 + \tilde{\kappa}_2^2)k^2 + \tilde{\kappa}_0^2\tilde{\kappa}_2^2 - \kappa_0^2\kappa_2^2(\bar{Y}_{20})^2 = (k^2 + \tilde{\gamma}_0^2)(k^2 + \tilde{\gamma}_2^2) \quad (2.28)$$

де

$$\tilde{\gamma}_0^2 = \frac{1}{2} \left( \tilde{\kappa}_0^2 + \tilde{\kappa}_2^2 - \sqrt{(\tilde{\kappa}_0^2 - \tilde{\kappa}_2^2)^2 + 4\kappa_0^2\kappa_2^2(\bar{Y}_{20})^2} \right), \quad (2.29)$$

$$\tilde{\gamma}_2^2 = \frac{1}{2} \left( \tilde{\kappa}_0^2 + \tilde{\kappa}_2^2 + \sqrt{(\tilde{\kappa}_0^2 - \tilde{\kappa}_2^2)^2 + 4\kappa_0^2\kappa_2^2(\bar{Y}_{20})^2} \right), \quad (2.30)$$

Далі вважатимемо параметри системи такими, що приводять до позитивних значень введених вище величин  $\tilde{\gamma}_0^2$  і  $\tilde{\gamma}_2^2$ . Для цього достатньо, щоб виконувалася наступна умова:

$$(\alpha_0^2 + \kappa_0^2)(\alpha_2^2 + \kappa_2^2\bar{Y}_{20}^2) > \kappa_0^2\kappa_2^2(\bar{Y}_{20})^2 \quad (2.31)$$

Відкладаючи детальний аналіз цієї умови, відмітимо тільки що у випадку ізотропної фази  $S = 0$  дана умова зводиться до позитивного значення величин  $\tilde{\kappa}_0^2$  і  $\tilde{\kappa}_2^2$ . Позитивне значення параметра  $\tilde{\kappa}_0^2$  відповідає відсутності фазового переходу "рідина-газ" у системі. Дещо аналогічний зміст має умова  $\tilde{\kappa}_2^2 > 0$ .

Знайдемо оригінал гармоніки  $\tilde{h}_{000}(k)$ :

$$\begin{aligned} h_{000}(R) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{k} e^{-i\vec{k}\vec{R}} \tilde{h}_{000}(k) \\ &= -\frac{\kappa_0^2}{\rho} \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{k} \frac{(k + i\tilde{\kappa}_2)(k - i\tilde{\kappa}_2) e^{-i\vec{k}\vec{R}}}{(k + i\tilde{\gamma}_0)(k - i\tilde{\gamma}_0)(k + i\tilde{\gamma}_2)(k - i\tilde{\gamma}_2)} \\ &= -\frac{A_0}{T} \frac{1}{R} \left\{ \frac{\tilde{\gamma}_2^2 - \tilde{\kappa}_0^2}{\tilde{\gamma}_0^2 - \tilde{\gamma}_2^2} e^{-\tilde{\gamma}_0 R} + \frac{\tilde{\gamma}_2^2 - \tilde{\kappa}_2^2}{\tilde{\gamma}_0^2 - \tilde{\gamma}_2^2} e^{-\tilde{\gamma}_2 R} \right\} \quad (2.32) \end{aligned}$$

Аналогічно знаходимо оригінали решти гармонік:

$$h_{020}(R) = -\frac{A_2\kappa_0^2\bar{Y}_{20}}{T} \frac{1}{R} \frac{e^{-\tilde{\gamma}_0 R} - e^{-\tilde{\gamma}_2 R}}{\tilde{\gamma}_0^2 - \tilde{\gamma}_2^2} \quad (2.33)$$

$$h_{220}(R) = \frac{A_2}{T} \frac{1}{R} \left\{ \frac{\tilde{\gamma}_2^2 - \tilde{\kappa}_2^2}{\tilde{\gamma}_0^2 - \tilde{\gamma}_2^2} e^{-\tilde{\gamma}_0 R} + \frac{\tilde{\gamma}_2^2 - \tilde{\kappa}_0^2}{\tilde{\gamma}_0^2 - \tilde{\gamma}_2^2} e^{-\tilde{\gamma}_2 R} \right\} \quad (2.34)$$

## 2.2. Просторово-неоднорідний випадок

Для спрощення викладок при розгляді просторово-неоднорідних систем обмежимося випадком однакового степеня загасання ізотропної та анізотропної взаємодій, тобто покладемо  $\alpha_2 = \alpha_0 = \alpha$ .

Враховуючи умови замикання рівнянь для точкових частинок (1.4) та сходячкове наближення для профілю густини частинок, знайдемо гармоніки парної кореляційної функції. Подібним чином, як для ізотропних систем [4, 14, 15], враховуючи симетрію потенціальної енергії виділимо у гармоніках парної кореляційної функції координатні залежності в перпендикулярному і паралельному до поверхні напрямках

$$h_{lm\mu}(\vec{R}_1, \vec{R}_2) = h_{lm\mu}(s_{12}, z_1, z_2) \quad (2.35)$$

та введемо односторонні гармоніки парної кореляційної функції

$$\begin{aligned} h_{lm\mu}(s_{12}, z_1, z_2) &= h_{lm\mu}^+(s_{12}, z_1, z_2) - h_{lm\mu}^-(s_{12}, z_1, z_2), \\ h_{lm\mu}^+(s_{12}, z_1, z_2) &= \begin{cases} h_{lm\mu}(s_{12}, z_1, z_2), & z_1 > 0, \\ 0, & z_1 < 0, \end{cases} \\ h_{lm\mu}^-(s_{12}, z_1, z_2) &= \begin{cases} 0, & z_1 > 0, \\ -h_{lm\mu}(s_{12}, z_1, z_2), & z_1 < 0. \end{cases} \end{aligned} \quad (2.36)$$

Підставивши (2.36) у систему рівнянь (2.3)–(2.6), для односторонніх гармонік отримаємо наступну систему рівнянь:

$$\begin{aligned} h_{22\mu}^+(s_{12}, z_1, z_2) - h_{22\mu}^-(s_{12}, z_1, z_2) &= c_{22\mu}(R_{12}) + \mu \neq 0 \\ \rho \langle |Y_{2\mu}(\Omega)|^2 \rangle_{\Omega} \int_V d\vec{R}_3 c_{22\mu}(s_{13}, z_1, z_3) h_{22\mu}^+(s_{32}, z_3, z_2), \end{aligned} \quad (2.37)$$

$$\begin{aligned} h_{000}^+(s_{12}, z_1, z_2) - h_{000}^-(s_{12}, z_1, z_2) &= c_{000}(R_{12}) + \\ \rho \int_V d\vec{R}_3 c_{000}(s_{13}, z_1, z_3) h_{000}^+(s_{32}, z_3, z_2) + \\ \rho \langle |Y_{20}(\Omega)| \rangle_{\Omega} \int_V d\vec{R}_3 c_{000}(s_{13}, z_1, z_3) h_{200}^+(s_{32}, z_3, z_2), \end{aligned} \quad (2.38)$$

$$\begin{aligned} h_{200}^+(s_{12}, z_1, z_2) - h_{200}^-(s_{12}, z_1, z_2) &= \\ \rho \langle |Y_{20}(\Omega)| \rangle_{\Omega} \int_V d\vec{R}_3 c_{220}(s_{13}, z_1, z_3) h_{000}^+(s_{32}, z_3, z_2) + \\ \rho \langle |Y_{20}(\Omega)|^2 \rangle_{\Omega} \int_V d\vec{R}_3 c_{220}(s_{13}, z_1, z_3) h_{200}^+(s_{32}, z_3, z_2), \end{aligned} \quad (2.39)$$

$$h_{020}^+(s_{12}, z_1, z_2) - h_{020}^-(s_{12}, z_1, z_2) = \int_V d\vec{R}_3 c_{000}(s_{13}, z_1, z_3) h_{020}^+(s_{32}, z_3, z_2) + \rho \langle |Y_{20}(\Omega)| \rangle_\Omega \int_V d\vec{R}_3 c_{000}(s_{13}, z_1, z_3) h_{220}^+(s_{32}, z_3, z_2), \quad (2.40)$$

$$h_{220}^+(s_{12}, z_1, z_2) - h_{220}^-(s_{12}, z_1, z_2) = c_{220}(s_{13}, z_1, z_3) \langle |Y_{20}(\Omega)| \rangle_\Omega \int_V d\vec{R}_3 c_{220}(s_{13}, z_1, z_3) h_{020}^+(s_{32}, z_3, z_2) + \rho \langle |Y_{20}(\Omega)|^2 \rangle_\Omega \int_V d\vec{R}_3 c_{220}(s_{13}, z_1, z_3) h_{220}^+(s_{32}, z_3, z_2). \quad (2.41)$$

Здійснимо тепер перетворення Фур'є системи рівнянь (2.38) – (2.41). Відмітимо, що фур'є-образи односторонніх функцій є аналітичними функціями у відповідних половинах комплексної площини. Оскільки

$$c_{000}(s_{12}, z_1, z_2) = -\frac{A_0 \exp(-\alpha_0 \sqrt{s_{12}^2 + (z_1 - z_2)^2})}{T \sqrt{s_{12}^2 + (z_1 - z_2)^2}}, \quad (2.42)$$

$$c_{220}(s_{12}, z_1, z_2) = -\frac{A_2 \exp(-\alpha_0 \sqrt{s_{12}^2 + (z_1 - z_2)^2})}{T \sqrt{s_{12}^2 + (z_1 - z_2)^2}}, \quad (2.43)$$

то фур'є-образами цих гармонік будуть функції

$$\tilde{c}_{000}(q_1) = -4\pi \frac{A_0}{T} \frac{1}{p^2 + q_1^2 + \alpha_0^2}, \quad (2.44)$$

$$\tilde{c}_{220}(q_1) = -4\pi \frac{A_2}{T} \frac{1}{p^2 + q_1^2 + \alpha_0^2}. \quad (2.45)$$

Тоді для фур'є-образів односторонніх гармонік парної кореляційної функції матимемо наступну систему рівнянь:

$$\left(1 + \frac{\kappa_2^2 \bar{Y}_{2\mu}^2}{p^2 + q_1^2 + \alpha_0^2}\right) \tilde{h}_{22\mu}^+(q_1) - \tilde{h}_{22\mu}^-(q_1) = -4\pi \frac{A_2}{T} \frac{1}{p^2 + q_2^2 + \alpha_0^2} \delta(q_1 + q_2), \quad \text{для } \mu \neq 0 \quad (2.46)$$

$$\left(1 + \frac{\kappa_0^2}{p^2 + q_1^2 + \alpha_0^2}\right) \tilde{h}_{000}^+(q_1) + \frac{\kappa_0^2 \bar{Y}_{20}}{p^2 + q_1^2 + \alpha_0^2} \tilde{h}_{200}^+(q_1) - \tilde{h}_{000}^-(q_1) = -4\pi \frac{A_0}{T} \frac{1}{p^2 + q_2^2 + \alpha_0^2} \delta(q_1 + q_2), \quad (2.47)$$

$$\left(1 + \frac{\kappa_2^2 \bar{Y}_{20}^2}{p^2 + q_1^2 + \alpha_0^2}\right) \tilde{h}_{200}^+(q_1) + \frac{\kappa_2^2 \bar{Y}_{20}}{p^2 + q_1^2 + \alpha_0^2} \tilde{h}_{000}^+(q_1) - \tilde{h}_{200}^-(q_1) = 0, \quad (2.48)$$

$$\left(1 + \frac{\kappa_0^2}{p^2 + q_1^2 + \alpha_0^2}\right) \tilde{h}_{020}^+(q_1) + \frac{\kappa_0^2 \bar{Y}_{20}}{p^2 + q_1^2 + \alpha_0^2} \tilde{h}_{220}^+(q_1) - \tilde{h}_{020}^-(q_1) = 0, \quad (2.49)$$

$$\left(1 + \frac{\kappa_2^2 \bar{Y}_{20}^2}{p^2 + q_1^2 + \alpha_0^2}\right) \tilde{h}_{220}^+(q_1) + \frac{\kappa_2^2 \bar{Y}_{20}}{p^2 + q_1^2 + \alpha_0^2} \tilde{h}_{020}^+(q_1) - \tilde{h}_{220}^-(q_1) = -4\pi \frac{A_2}{T} \frac{1}{p^2 + q_2^2 + \alpha_0^2} \delta(q_1 + q_2), \quad (2.50)$$

де  $\delta(q_1 + q_2)$  –  $\delta$ -функція Дірака.

Представимо системи рівнянь (2.47), (2.48) та (2.49), (2.50) у матричній формі

$$\frac{1}{q_1^2 + \alpha_0^2(p)} \mathbf{P}(q_1) \cdot \mathbf{h}_0^+(q_1) - \mathbf{h}_0^-(q_1) = \mathbf{L}_0(q_1), \quad (2.51)$$

$$\frac{1}{q_1^2 + \alpha_0^2(p)} \mathbf{P}(q_1) \cdot \mathbf{h}_2^+(q_1) - \mathbf{h}_2^-(q_1) = \mathbf{L}_2(q_1), \quad (2.52)$$

де матриці визначаються наступними рівностями:

$$\mathbf{P}(q_1) = \begin{pmatrix} q_1^2 + \kappa_0^2(p), & \kappa_0^2 \bar{Y}_{20} \\ \kappa_2^2 \bar{Y}_{20}, & q_1^2 + \kappa_2^2(p) \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{h}_0^+(q_1) = \begin{pmatrix} \tilde{h}_{000}^+(q_1) \\ \tilde{h}_{200}^+(q_1) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{h}_0^-(q_1) = \begin{pmatrix} \tilde{h}_{000}^-(q_1) \\ \tilde{h}_{200}^-(q_1) \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{h}_2^+(q_1) = \begin{pmatrix} \tilde{h}_{020}^+(q_1) \\ \tilde{h}_{220}^+(q_1) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{h}_2^-(q_1) = \begin{pmatrix} \tilde{h}_{020}^-(q_1) \\ \tilde{h}_{220}^-(q_1) \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{L}_0(q_1) = -4\pi \frac{A_0}{T} \frac{\delta(q_1 + q_2)}{q_2^2 + \alpha_0^2(p)} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{L}_2(q_1) = -4\pi \frac{A_2}{T} \frac{\delta(q_1 + q_2)}{q_2^2 + \alpha_0^2(p)} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$



а також введено позначення

$$\alpha_0^2(p) = p^2 + \alpha_0^2, \quad \kappa_0^2(p) = \alpha_0^2(p) + \kappa_0^2, \quad \kappa_2^2(p) = \alpha_0^2(p) + \bar{Y}_{20}^2 \kappa_2^2. \quad (2.53)$$

Знайдемо розв'язки рівнянь (2.46), (2.51) і (2.52). Рівняння (2.46) аналогічне рівнянню для юкавівської системи ізотропних частинок, розв'язки якого були знайдені у праці [7]. Скориставшись цими результатами, явний вираз для гармонік  $\tilde{h}_{22\mu}^+(s_{21}, z_1, z_2)$ ,  $\tilde{h}_{22\mu}^-(s_{21}, z_1, z_2)$ , ( $\mu \neq 0$ ) запишемо нижче.

Розглянемо рівняння (2.51). З теорії систем сингулярних рівнянь [16, 17] відомо, що розв'язок неоднорідної системи (2.51) має вигляд

$$\mathbf{h}_0^+(q_1) = \mathbf{X}^+(q_1) \cdot \Psi_0^+(q_1), \quad (2.54)$$

$$\mathbf{h}_0^-(q_1) = \mathbf{X}^-(q_1) \cdot \Psi_0^-(q_1), \quad (2.55)$$

де:  $\mathbf{X}(\varsigma) = \mathbf{X}^+(\varsigma)$ , ( $\varsigma \in \mathbb{C}^+$ ) і  $\mathbf{X}(\varsigma) = \mathbf{X}^-(\varsigma)$ , ( $\varsigma \in \mathbb{C}^-$ ) канонічна матриця, яка відповідає однорідному рівнянню. Останнє одержується із рівності (2.51), коли праву частину покласти рівною нулю. Елементи матриць  $\Psi_0^+(q_1)$  та  $\Psi_0^-(q_1)$  аналітичні у верхній або нижній половині комплексної площини відповідно і визначаються за співвідношенням

$$\Psi_0^+(q_1) - \Psi_0^-(q_1) = (\mathbf{X}^-(-q_2))^{-1} \cdot \mathbf{L}_0(q_1). \quad (2.56)$$

Розглянемо однорідне рівняння

$$\frac{1}{q_1^2 + \alpha_0^2(p)} \mathbf{P}(q_1) \cdot \varphi^+(q_1) - \varphi^-(q_1) = 0. \quad (2.57)$$

У випадку раціональних матриць, побудованих з коефіцієнтів при невідомих функціях, можна виконати факторизацію матриці і отримати розв'язки системи рівнянь у явному вигляді. Відомо [17, 18], що не вироджену поліноміальну матрицю можна привести до діагонального вигляду за допомогою двох поліноміальних матриць з незалежними від змінної не рівними нулю детермінантами. Тому представимо  $\mathbf{P}(q_1)$  у вигляді:

$$\mathbf{P}(q_1) = \mathbf{T}(q_1) \cdot \mathbf{D}(q_1) \cdot \mathbf{S}(q_1), \quad (2.58)$$

у якому  $\mathbf{D}(q_1)$  – діагональна матриця, а  $\det \mathbf{T}(q_1) \neq 0$ ,  $\det \mathbf{S}(q_1) \neq 0$  не залежать від змінної  $q_1$ . Підставимо виражену за допомогою представлення (2.58) матрицю  $\mathbf{P}(q_1)$  у рівність (2.57)

$$\frac{1}{q_1^2 + \alpha_0^2(p)} \mathbf{T}(q_1) \cdot \mathbf{D}(q_1) \cdot \mathbf{S}(q_1) \cdot \varphi^+(q_1) = \varphi^-(q_1). \quad (2.59)$$

Виконаємо факторизацію діагональної матриці  $\mathbf{D}(q_1)$ , яка полягає у представленні кожного з діагональних елементів матриці у вигляді добутку матриць таких, що не мають нулів відповідно у верхній та нижній половині комплексної площини. Останні дві матриці позначимо відповідними нижніми індексами на відміну від матриць аналітичних функцій

$$\mathbf{D}(q_1) = \mathbf{D}_+(q_1) \cdot \mathbf{D}_-(q_1). \quad (2.60)$$

Використавши факторизацію, замість рівності (2.59) матимемо:

$$\frac{1}{q_1 + i\alpha_0(p)} \mathbf{D}_+(q_1) \cdot \mathbf{S}(q_1) \cdot \varphi^+(q_1) = (q_1 - i\alpha_0(p)) (\mathbf{D}_-)^{-1}(q_1) \cdot \mathbf{T}^{-1}(q_1) \cdot \varphi^-(q_1). \quad (2.61)$$

Звідси знаходимо

$$\begin{aligned} \varphi^+(q_1) &= (q_1 + i\alpha_0(p)) \mathbf{S}^{-1}(q_1) \cdot (\mathbf{D}_+)^{-1}(q_1), \\ \varphi^-(q_1) &= \frac{1}{q_1 - i\alpha_0(p)} \mathbf{T}(q_1) \cdot \mathbf{D}_-(q_1). \end{aligned} \quad (2.62)$$

Отриманий розв'язок однорідного рівняння являє собою так званий нормальний розв'язок. В праці [17] представлено ефективний метод знаходження канонічної матриці, коли відомі нормальні розв'язки

Аналогічно знайдемо розв'язки матричного рівняння (2.52):

$$\mathbf{h}_2^+(q_1) = \mathbf{X}^+(q_1) \cdot \Psi_2^+(q_1), \quad (2.63)$$

$$\mathbf{h}_2^-(q_1) = \mathbf{X}^-(q_1) \cdot \Psi_2^-(q_1), \quad (2.64)$$

де:

$$\Psi_2^+(q_1) - \Psi_2^-(q_1) = (\mathbf{X}^-(-q_2))^{-1} \cdot \mathbf{L}_2(q_1). \quad (2.65)$$

Таким чином нами отримано вирази, які дозволяють знайти гармоніки парної кореляційної функції. Для їх розрахунку необхідно знати факторизаційні матриці  $\mathbf{T}(q_1)$  та  $\mathbf{S}(q_1)$ .

### 3. Розрахунок канонічних матриць

Запишемо рівняння (2.58) у вигляді

$$\mathbf{P}(q_1) \cdot (\mathbf{S})^{-1}(q_1) - \mathbf{T}(q_1) \cdot \mathbf{D}(q_1) = 0. \quad (3.1)$$

Завдяки однорідності рівняння (3.1)

$$\det(\mathbf{S})^{-1}(q_1) = \det \mathbf{T}(q_1). \quad (3.2)$$

Із рівностей (3.1) і (3.2) випливає

$$\det \mathbf{D}(q_1) = \det \mathbf{P}(q_1). \quad (3.3)$$

Оскільки детермінант матриці рівний

$$\det \mathbf{P}(q_1) = (q_1^2 + \gamma_0^2(p))(\gamma_1^2 + \gamma_2^2(p)), \quad (3.4)$$

де  $\gamma_0^2(p)$ ,  $\gamma_2^2(p)$  – корені біквдратного рівняння

$$\gamma^4 - (\kappa_0^2(p) + \kappa_2^2(p))\gamma^2 + \kappa_0^2(p)\kappa_2^2(p) - \kappa_0^2\kappa_2^2(\bar{Y}_{20})^2 = 0. \quad (3.5)$$

Звідки:

$$\begin{aligned} \gamma_0^2(p) &= p^2 + \gamma_0^2, & \gamma_2^2(p) &= p^2 + \gamma_2^2, \\ \gamma_0^2 &= \frac{1}{2} \left( \kappa_0^2 + \kappa_2^2 \bar{Y}_{20}^2 + 2\alpha_0^2 - \sqrt{(\kappa_0^2 - \kappa_2^2 \bar{Y}_{20}^2)^2 + 4\kappa_0^2\kappa_2^2(\bar{Y}_{20})^2} \right), \\ \gamma_2^2 &= \frac{1}{2} \left( \kappa_0^2 + \kappa_2^2 \bar{Y}_{20}^2 + 2\alpha_0^2 + \sqrt{(\kappa_0^2 - \kappa_2^2 \bar{Y}_{20}^2)^2 + 4\kappa_0^2\kappa_2^2(\bar{Y}_{20})^2} \right). \end{aligned} \quad (3.6)$$

Діагональну матрицю  $\mathbf{D}(q_1)$  запишемо у наступному вигляді

$$\mathbf{D}(q_1) = \begin{pmatrix} q_1^2 + \gamma_0^2(p), & 0 \\ 0, & q_1^2 + \gamma_2^2(p) \end{pmatrix}. \quad (3.7)$$

Надалі вважатимемо, що густина системи, температура і параметри взаємодії задовольняють умові  $\gamma_0^2(p) > 0$ . Тоді поліноміальний вигляд елементів матриці (3.7) дозволяє безпосередньо отримати  $\mathbf{D}_+(q_1)$  та  $\mathbf{D}_-(q_1)$ :

$$\mathbf{D}_+(q_1) = \begin{pmatrix} q_1 + i\gamma_0(p), & 0 \\ 0, & q_1 + i\gamma_2(p) \end{pmatrix}, \quad (3.8)$$

$$\mathbf{D}_-(q_1) = \begin{pmatrix} q_1 - i\gamma_0(p), & 0 \\ 0, & q_1 - i\gamma_2(p) \end{pmatrix}. \quad (3.9)$$

Елементи канонічних матриць являють собою постійні величини, незалежні від змінної  $q_1$  [18]. При цьому матриця  $\mathbf{S}^{-1}(q_1)$  співпадає з  $\mathbf{T}(q_1)$ , а недіагональні елементи можна покласти рівними одиниці. Тоді факторизаційні матриці запишемо у наступному вигляді

$$\mathbf{S}^{-1} = \mathbf{T} = \begin{pmatrix} t_1, & 1 \\ 1, & t_2 \end{pmatrix}, \quad (3.10)$$

Підставимо співвідношення (3.10) у рівняння (3.1) і прирівняємо коефіцієнти при відповідних степенях  $q_1$ . В результаті отримаємо систему 4-ох лінійних рівнянь, яка внаслідок вибору недіагональних елементів рівними одиниці є неоднорідною. Оскільки діагональна матриця має вигляд (3.7), не всі рівняння системи є незалежними. В результаті кількість рівнянь і кількість невідомих коефіцієнтів співпадають і матриці  $\mathbf{T}(q_1)$  та  $\mathbf{S}(q_1)$  визначаються однозначно. Розв'язуючи отриману систему рівнянь, для невідомих коефіцієнтів маємо

$$t_1 = -\frac{\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2}{\kappa_2^2 \bar{Y}_{20}}, \quad t_2 = \frac{\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2}{\kappa_0^2 \bar{Y}_{20}} \quad (3.11)$$

Звідси знаходимо факторизаційні матриці

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} -\frac{\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2}{\kappa_2^2 \bar{Y}_{20}}, & 1 \\ 1, & \frac{\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2}{\kappa_0^2 \bar{Y}_{20}} \end{pmatrix}, \quad (3.12)$$

$$\mathbf{S} = \mathbf{T}^{-1} = \frac{\kappa_0^2 \kappa_2^2 (\bar{Y}_{20})^2}{(\gamma_2^2 - \gamma_0^2)(\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2)} \begin{pmatrix} -\frac{\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2}{\kappa_0^2 \bar{Y}_{20}}, & 1 \\ 1, & \frac{\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2}{\kappa_2^2 \bar{Y}_{20}} \end{pmatrix}. \quad (3.13)$$

Відмітимо, що згідно (3.6) можна показати, що

$$-(\gamma_0^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2) = \gamma_2^2 - \kappa_2^2 \bar{Y}_{20}^2 - \alpha_0^2 \quad (3.14)$$

$$\frac{\kappa_0^2 \kappa_2^2 (\bar{Y}_{20})^2}{\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2} = \gamma_2^2 - \kappa_2^2 \bar{Y}_{20}^2 - \alpha_0^2 \quad (3.15)$$

Ці співвідношення є корисні при перевірці рівності (3.1), виходячи з отриманих виразів для матриць  $\mathbf{T}$  і  $\mathbf{S}$ .

#### 4. Орієнтаційні гармоніки парної кореляційної функції

Розглянемо тепер нормальні розв'язки (2.62). Враховуючи вигляд факторизаційних матриць (3.13) та факторизованих діагональних

матриць (3.8), отримаємо нормальні розв'язки у вигляді

$$\varphi^+(q_1) = \begin{pmatrix} -\frac{\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2}{\kappa_2^2 \bar{Y}_{20}}, & 1 \\ 1, & \frac{\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2}{\kappa_0^2 \bar{Y}_{20}} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \frac{q_1 + i\alpha_0(p)}{q_1 + i\gamma_0(p)}, & 0 \\ 0, & \frac{q_1 + i\alpha_0(p)}{q_1 + i\gamma_2(p)} \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} -\frac{\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2}{\kappa_2^2 \bar{Y}_{20}} \frac{q_1 + i\alpha_0(p)}{q_1 + i\gamma_0(p)}, & \frac{q_1 + i\alpha_0(p)}{q_1 + i\gamma_2(p)} \\ \frac{q_1 + i\alpha_0(p)}{q_1 + i\gamma_0(p)}, & \frac{\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2}{\kappa_0^2 \bar{Y}_{20}} \frac{q_1 + i\alpha_0(p)}{q_1 + i\gamma_2(p)} \end{pmatrix}, \quad (4.1)$$

$$\varphi^-(q_1) = \begin{pmatrix} -\frac{\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2}{\kappa_2^2 \bar{Y}_{20}}, & 1 \\ 1, & \frac{\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2}{\kappa_0^2 \bar{Y}_{20}} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \frac{q_1 - i\gamma_0(p)}{q_1 - i\alpha_0(p)}, & 0 \\ 0, & \frac{q_1 - i\gamma_2(p)}{q_1 - i\alpha_0(p)} \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} -\frac{\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2}{\kappa_2^2 \bar{Y}_{20}} \frac{q_1 - i\gamma_0(p)}{q_1 - i\alpha_0(p)}, & \frac{q_1 - i\gamma_2(p)}{q_1 - i\alpha_0(p)} \\ \frac{q_1 - i\gamma_0(p)}{q_1 - i\alpha_0(p)}, & \frac{\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2}{\kappa_0^2 \bar{Y}_{20}} \frac{q_1 - i\gamma_2(p)}{q_1 - i\alpha_0(p)} \end{pmatrix}. \quad (4.2)$$

Детермінанти матриць  $\varphi^+(q_1)$  і  $\varphi^-(q_1)$  на безмежності приймають скінченне відмінне від нуля значення. В цьому випадку [17] нормальні розв'язки однорідного рівняння є одночасно канонічними.

$$\mathbf{X}^+(q_1) = \varphi^+(q_1), \quad \mathbf{X}^-(q_1) = \varphi^-(q_1). \quad (4.3)$$

Знайдемо фур'є-образи гармонік парної кореляційної функції. Для цього скористаємося рівністю (2.59) та співвідношенням (2.61). З останнього, використавши (2.58), представлення  $\delta$ -функції Дірака у вигляді різниці односторонніх  $\delta$ -функцій аналітичних у верхній та нижній половинах комплексної площини відповідно

$$\delta(q_1 + q_2) = \delta_+(q_1 + q_2) - \delta_-(q_1 + q_2) \quad (4.4)$$

та рівності (4.1), (4.2) і (4.3), знайдемо матриці  $\Psi_0^+(q_1)$ ,  $\Psi_0^-(q_1)$ ,

$\Psi_2^+(q_1)$ ,  $\Psi_2^-(q_1)$

$$\Psi_0^\pm(q_1) = 4\pi \frac{A_0}{T} \frac{\kappa_0^2 \kappa_2^2 (\bar{Y}_{20})^2}{(\gamma_2^2 - \gamma_0^2)(\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2)}$$

$$\times \frac{\delta_\pm(q_1 + q_2)}{q_2 - i\alpha_0(p)} \begin{pmatrix} \frac{\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2}{\kappa_0^2 \bar{Y}_{20}} \frac{1}{q_2 + i\gamma_0(p)} \\ -\frac{1}{q_2 + i\gamma_2(p)} \end{pmatrix}, \quad (4.5)$$

$$\Psi_2^\pm(q_1) = -4\pi \frac{A_2}{T} \frac{\kappa_0^2 \kappa_2^2 (\bar{Y}_{20})^2}{(\gamma_2^2 - \gamma_0^2)(\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2)}$$

$$\times \frac{\delta_\pm(q_1 + q_2)}{q_2 - i\alpha_0(p)} \begin{pmatrix} \frac{1}{q_2 + i\gamma_0(p)} \\ \frac{\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2}{\kappa_2^2 \bar{Y}_{20}} \frac{1}{q_2 + i\gamma_2(p)} \end{pmatrix}.$$

Тоді із співвідношень (2.59) і (2.60) матриці, елементами яких є фур'є-образи гармонік парних кореляційних функцій матимуть наступний вигляд:

$$\mathbf{h}_0^+(q_1) = -4\pi \frac{A_0}{T} \frac{\kappa_2^2 \bar{Y}_{20}}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \frac{\delta_+(q_1 + q_2)}{(\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2)(q_2 - i\alpha_0(p))} \times$$

$$\begin{pmatrix} \frac{(\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2)^2}{\kappa_2^2 \bar{Y}_{20} (q_1 + i\gamma_0(p))(q_2 + i\gamma_0(p))} + \frac{\kappa_0^2 \bar{Y}_{20}}{(q_1 + i\gamma_2(p))(q_2 + i\gamma_2(p))} \\ -\frac{\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2}{(q_1 + i\gamma_0(p))(q_2 + i\gamma_0(p))} + \frac{\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2}{(q_1 + i\gamma_2(p))(q_2 + i\gamma_2(p))} \end{pmatrix}, \quad (4.6)$$

$$\mathbf{h}_0^-(q_1) = -4\pi \frac{A_0}{T} \frac{\kappa_2^2 \bar{Y}_{20}}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \frac{\delta_-(q_1 + q_2)}{(q_1 - i\alpha_0(p))(q_2 - i\alpha_0(p))} \times$$

$$\begin{pmatrix} \frac{\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2}{\kappa_2^2 \bar{Y}_{20}} \frac{q_1 - i\gamma_0(p)}{q_2 + i\gamma_0(p)} + \frac{\kappa_0^2 \bar{Y}_{20}}{\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2} \frac{q_1 - i\gamma_2(p)}{q_2 + i\gamma_2(p)} \\ -\frac{q_1 - i\gamma_0(p)}{q_2 + i\gamma_0(p)} + \frac{q_1 - i\gamma_2(p)}{q_2 + i\gamma_2(p)} \end{pmatrix}, \quad (4.7)$$

Подібним чином знайдемо матриці  $\mathbf{h}_2^+(q_1)$  і  $\mathbf{h}_2^-(q_1)$

$$\mathbf{h}_2^+(q_1) = -4\pi \frac{A_2}{T} \frac{\kappa_0^2 \bar{Y}_{20}}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \frac{\delta_+(q_1 + q_2)(q_1 + i\alpha_0(p))}{(\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2)(q_2 - i\alpha_0(p))} \times$$

$$\left( \begin{array}{c} -\frac{\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2}{(q_1 + i\gamma_0(p))(q_2 + i\gamma_0(p))} + \frac{\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2}{(q_1 + i\gamma_2(p))(q_2 + i\gamma_2(p))} \\ \frac{\kappa_0^2 \bar{Y}_{20}}{(q_1 + i\gamma_0(p))(q_2 + i\gamma_0(p))} + \frac{(\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2)^2}{\kappa_0^2 \bar{Y}_{20}(q_1 + i\gamma_2(p))(q_2 + i\gamma_2(p))} \end{array} \right), \quad (4.8)$$

$$\mathbf{h}_2^-(q_1) = -4\pi \frac{A_2}{T} \frac{\kappa_0^2 \bar{Y}_{20}}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \frac{\delta_-(q_1 + q_2)}{(q_1 - i\alpha_0(p))(q_2 - i\alpha_0(p))} \times$$

$$\left( \begin{array}{c} -\frac{q_1 - i\gamma_0(p)}{q_2 + i\gamma_0(p)} + \frac{q_1 - i\gamma_2(p)}{q_2 + i\gamma_2(p)} \\ \frac{\kappa_0^2 \bar{Y}_{20}}{\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2} \frac{q_1 - i\gamma_0(p)}{q_2 + i\gamma_0(p)} + \frac{\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2}{\kappa_0^2 \bar{Y}_{20}} \frac{q_1 - i\gamma_2(p)}{q_2 + i\gamma_2(p)} \end{array} \right). \quad (4.9)$$

Враховуючи вигляд матриць  $\mathbf{h}_0^+(q_1)$ ,  $\mathbf{h}_0^-(q_1)$ ,  $\mathbf{h}_2^+(q_1)$  і  $\mathbf{h}_2^-(q_1)$ , можна визначити відповідні гармоніки парної кореляційної функції.

Розрахуємо тепер оригінали орієнтаційних гармонік парної кореляційної функції. Розглянемо гармоніку  $\tilde{h}_{000}^+(q_1)$ . Врахувавши вигляд матриці  $\mathbf{h}_0^+(q_1)$  (2.53), з рівності (4.8) отримуємо

$$\tilde{h}_{000}^+(q_1) =$$

$$-4\pi \frac{A_0}{T} \frac{\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \frac{\delta_+(q_1 + q_2)}{(q_2 + i\gamma_0(p))(q_2 - i\alpha_0(p))} \frac{q_1 + i\alpha_0(p)}{q_1 + i\gamma_0(p)}$$

$$-4\pi \frac{A_0}{T} \frac{\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \frac{\delta_+(q_1 + q_2)}{(q_2 + i\gamma_2(p))(q_2 - i\alpha_0(p))} \frac{q_1 + i\alpha_0(p)}{q_1 + i\gamma_2(p)} \quad (4.10)$$

Виконаємо в (4.10) інтегрування за змінною  $q_1$ . Функція  $\tilde{h}_{000}^+(\zeta)$  є аналітичною функцією змінної  $\zeta$  у верхній частині комплексної площини, тому для нижньої частини декартової системи індивідуальних координат частинок ( $z < 0$ ) результат інтегрування буде рівним нулю. Використавши представлення

$$\delta_+(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{i}{x + i\varepsilon}, \quad \delta_-(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{i}{x - i\varepsilon}, \quad (4.11)$$

для  $z_1 > 0$  матимемо

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq_1}{2\pi} e^{-iq_1 z_1} \tilde{h}_{000}^+(q_1) = \quad (4.12)$$

$$-4\pi \frac{A_0}{T} \frac{\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \frac{1}{q_2^2 + \gamma_0^2(p)} \left( e^{iq_2 z_1} - i \frac{\gamma_0(p) - \alpha_0(p)}{q_2 - i\alpha_0(p)} e^{-\gamma_0(p) z_1} \right)$$

$$-4\pi \frac{A_0}{T} \frac{\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \frac{1}{q_2^2 + \gamma_2^2(p)} \left( e^{iq_2 z_1} - i \frac{\gamma_2(p) - \alpha_0(p)}{q_2 - i\alpha_0(p)} e^{-\gamma_2(p) z_1} \right)$$

Інтегруючи (4.12) за змінною  $q_2$ , коли  $z_2 > 0$ , отримуємо

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq_2}{2\pi} e^{-iq_2 z_2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq_1}{2\pi} e^{-iq_1 z_1} \tilde{h}_{000}^+(q_1) = \quad (4.13)$$

$$-2\pi \frac{A_0}{T} \frac{\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \frac{1}{\gamma_0(p)} e^{-\gamma_0(p)|z_1 - z_2|} -$$

$$-2\pi \frac{A_0}{T} \frac{\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \frac{1}{\gamma_0(p)} \frac{\gamma_0(p) - \alpha_0(p)}{\gamma_0(p) + \alpha_0(p)} e^{-\gamma_0(p)(z_1 + z_2)}$$

$$-2\pi \frac{A_0}{T} \frac{\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \frac{1}{\gamma_2(p)} e^{-\gamma_2(p)|z_1 - z_2|}$$

$$-2\pi \frac{A_0}{T} \frac{\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \frac{1}{\gamma_2(p)} \frac{\gamma_2(p) - \alpha_0(p)}{\gamma_2(p) + \alpha_0(p)} e^{-\gamma_2(p)(z_1 + z_2)},$$

а коли друга частинка розташована у нижній частині простору  $z_2 < 0$ , інтеграл у лівій частині рівності (4.12) буде рівний наступному виразу:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq_2}{2\pi} e^{-iq_2 z_2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq_1}{2\pi} e^{-iq_1 z_1} \tilde{h}_{000}^+(q_1) = \quad (4.14)$$

$$-4\pi \frac{A_0}{T} \frac{\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \frac{1}{\gamma_0(p) + \alpha_0(p)} e^{-\gamma_0(p) z_1 + \alpha_0(p) z_2}$$

$$-4\pi \frac{A_0}{T} \frac{\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \frac{1}{\gamma_2(p) + \alpha_0(p)} e^{-\gamma_2(p) z_1 + \alpha_0(p) z_2}.$$

Здійснивши в рівності (4.13) обернене перетворення Фур'є за плоским вектором  $\vec{p}$ , гармоніку парної кореляційної функції  $\tilde{h}_{000}^+(q_1)$  у

випадку, коли  $z_1 > 0$ ,  $z_2 > 0$ , запишемо у вигляді

$$\begin{aligned}
h_{000}^{++}(s_{12}, z_1, z_2) &= -\frac{A_0}{T} \frac{\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \int_0^\infty J_0(ps_{12})pdp \\
&\left\{ \frac{1}{\gamma_0(p)} e^{-\gamma_0(p)|z_1 - z_2|} + \frac{1}{\gamma_0(p)} \frac{\gamma_0(p) - \alpha_0(p)}{\gamma_0(p) + \alpha_0(p)} e^{-\gamma_0(p)(z_1 + z_2)} \right\} \\
&-\frac{A_0}{T} \frac{\gamma_2^2 - \kappa_2^2 \bar{Y}_{20}^2 - \alpha_0^2}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \int_0^\infty J_0(ps_{12})pdp \\
&\left\{ \frac{1}{\gamma_2(p)} e^{-\gamma_2(p)|z_1 - z_2|} + \frac{1}{\gamma_2(p)} \frac{\gamma_2(p) - \alpha_0(p)}{\gamma_2(p) + \alpha_0(p)} e^{-\gamma_2(p)(z_1 + z_2)} \right\}
\end{aligned} \quad (4.15)$$

Верхні індекси помічають область простору, в якому розташовані частинки: "++", коли частинки 1 і 2 знаходяться у верхній частині простору, "+-", коли частинка 1 знаходиться у верхній, а 2 у нижній частині простору і т.д. Аналогічно можна знайти вирази для гармонік парної кореляційної функції для всіх випадків розташування частинок в просторі.

Оскільки система обмежена твердою стінкою нас цікавитимуть лише значення гармонік, коли обидві частинки знаходяться у верхній частині простору. Запишемо результат розрахунку решти гармонік парної кореляційної функції для  $z_1 > 0$ ,  $z_2 > 0$ , а результати розрахунку гармонік для інших випадків розташування частинок приведемо у Додатку.

$$\begin{aligned}
h_{200}^{++}(s_{12}, z_1, z_2) &= -\frac{A_0}{T} \frac{\kappa_2^2 \bar{Y}_{20}^2}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \int_0^\infty J_0(ps_{12})pdp \\
&\left\{ \frac{1}{\gamma_2(p)} e^{-\gamma_2(p)|z_1 - z_2|} + \frac{1}{\gamma_2(p)} \frac{\gamma_2(p) - \alpha_0(p)}{\gamma_2(p) + \alpha_0(p)} e^{-\gamma_2(p)(z_1 + z_2)} \right\} \\
&+\frac{A_0}{T} \frac{\kappa_2^2 \bar{Y}_{20}^2}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \int_0^\infty J_0(ps_{12})pdp \\
&\left\{ \frac{1}{\gamma_0(p)} e^{-\gamma_0(p)|z_1 - z_2|} + \frac{1}{\gamma_0(p)} \frac{\gamma_0(p) - \alpha_0(p)}{\gamma_0(p) + \alpha_0(p)} e^{-\gamma_0(p)(z_1 + z_2)} \right\}
\end{aligned} \quad (4.16)$$

$$\begin{aligned}
h_{020}^{++}(s_{12}, z_1, z_2) &= \frac{A_2}{T} \frac{\kappa_0^2 \bar{Y}_{20}^2}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \int_0^\infty \frac{J_0(ps_{12})pdp}{\gamma_0(p)} \\
&\left\{ e^{-\gamma_0(p)|z_1 - z_2|} + \frac{\gamma_0(p) - \alpha_0(p)}{\gamma_0(p) + \alpha_0(p)} e^{-\gamma_0(p)(z_1 + z_2)} \right\} \\
&-\frac{A_2}{T} \frac{\kappa_0^2 \bar{Y}_{20}^2}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \int_0^\infty \frac{J_0(ps_{12})pdp}{\gamma_2(p)} \\
&\left\{ e^{-\gamma_2(p)|z_1 - z_2|} + \frac{\gamma_2(p) - \alpha_0(p)}{\gamma_2(p) + \alpha_0(p)} e^{-\gamma_2(p)(z_1 + z_2)} \right\},
\end{aligned} \quad (4.17)$$

$$\begin{aligned}
h_{220}^{++}(s_{12}, z_1, z_2) &= -\frac{A_2}{T} \frac{\gamma_2^2 - \kappa_2^2 \bar{Y}_{20}^2 - \alpha_0^2}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \int_0^\infty \frac{J_0(ps_{12})pdp}{\gamma_0(p)} \\
&\left\{ e^{-\gamma_0(p)|z_1 - z_2|} + \frac{\gamma_0(p) - \alpha_0(p)}{\gamma_0(p) + \alpha_0(p)} e^{-\gamma_0(p)(z_1 + z_2)} \right\} \\
&-\frac{A_2}{T} \frac{\gamma_2^2 - \kappa_2^2 - \alpha_0^2}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \int_0^\infty \frac{J_0(ps_{12})pdp}{\gamma_2(p)} \\
&\left\{ e^{-\gamma_2(p)|z_1 - z_2|} + \frac{\gamma_2(p) - \alpha_0(p)}{\gamma_2(p) + \alpha_0(p)} e^{-\gamma_2(p)(z_1 + z_2)} \right\}.
\end{aligned}$$

Для гармонік парної кореляційної функції з  $\mu \neq 0$  з рівності (2.46), скориставшись результатами праці [7], матимемо

$$\begin{aligned}
h_{22\mu}^+(s_{12}, z_1, z_2) &= -\frac{A_2}{T} \int_0^\infty J_0(ps_{12})pdp \times \\
&\left\{ \frac{e^{-\gamma_{2\mu}(p)|z_1 - z_2|}}{\gamma_{2\mu}(p)} + \frac{e^{-\gamma_{2\mu}(p)(z_1 + z_2)}}{\gamma_{2\mu}(p)} \frac{\gamma_{2\mu}(p) - \alpha_0(p)}{\gamma_{2\mu}(p) + \alpha_0(p)} \right\},
\end{aligned} \quad (4.18)$$

де подібно, як для інших гармонік ми позначили

$$\gamma_{2\mu}^2(p) = p^2 + \alpha_0^2 + \kappa_2^2 \bar{Y}_{2\mu}^2, \quad \mu \neq 0. \quad (4.19)$$

Відмітимо, що наявність в потенціалі орієнтаційно залежної складової потенціалу приводить до появи в гармоніках парної кореляційної функції на великих віддальх між частинками двох показників її

загасання. Така поведінка парної кореляційної функції характерна для систем частинок із взаємодією, яка складається з двох юкавівських потенціалів з різними експонентними показниками. У виразах для гармонік присутні множники, які визначають вклад кожної з них у парну кореляційну функцію.

Отримані для гармонік вирази (4.15)–(4.18) дозволяють з рівності (2.1) знайти парну кореляційну функцію для просторово обмеженої системи нематиків. У випадку, коли обидві частинки знаходяться у верхній частині простору запишемо парну кореляційну функцію у вигляді:

$$h^{++}(R_{12}, \Omega_1, \Omega_2) = h_{000}^{++}(R_{12}) + h_{200}^{++}(R_{12}) [Y_{20}(\Omega_1) + Y_{20}(\Omega_2)] + \sum_{\mu>0} h_{22\mu}^{++}(R_{12}) Y_{2\mu}(\Omega_1) Y_{2\mu}^*(\Omega_2). \quad (4.20)$$

## 5. Вклад гармонік парної кореляційної функції в профіль густини числа частинок

Для повного опису структурних і термодинамічних властивостей просторово обмежених систем крім парної кореляційної функції необхідно знати і одночастинкову функцію розподілу (або профіль числа частинок). У [7] в рамках методу колективних змінних в наближенні хаотичних фаз отримано вираз для профілю густини системи з юкавівською взаємодією. Як і у випадку просторово неоднорідних кулонівських систем, у системах з юкавівським потенціалом взаємодії у профіль густини вносять вклад одночастинкові кореляційні функції, які виникають внаслідок ефективної взаємодії між частинками і поверхнею.

$$h_{000}^+(z_1) = -\frac{A_0}{T} \frac{\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \int_0^\infty \frac{pdp}{\gamma_0(p)} \frac{\gamma_0(p) - \alpha_0(p)}{\gamma_0(p) + \alpha_0(p)} e^{-2\gamma_0(p)z_1} + \frac{A_0}{T} \frac{\gamma_0^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \int_0^\infty \frac{pdp}{\gamma_2(p)} \frac{\gamma_2(p) - \alpha_0(p)}{\gamma_2(p) + \alpha_0(p)} e^{-2\gamma_2(p)z_1}, \quad (5.1)$$

$$h_{200}^+(z_1) = \frac{A_0}{T} \frac{\kappa_2^2 \bar{Y}_{20}}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \int_0^\infty \frac{pdp}{\gamma_0(p)} \frac{\gamma_0(p) - \alpha_0(p)}{\gamma_0(p) + \alpha_0(p)} e^{-2\gamma_0(p)z_1} - \frac{A_0}{T} \frac{\kappa_2^2 \bar{Y}_{20}}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \int_0^\infty \frac{pdp}{\gamma_2(p)} \frac{\gamma_2(p) - \alpha_0(p)}{\gamma_2(p) + \alpha_0(p)} e^{-2\gamma_2(p)z_1}, \quad (5.2)$$

$$h_{020}^+(z_1) = \frac{A_2}{T} \frac{\kappa_0^2 \bar{Y}_{20}}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \int_0^\infty \frac{pdp}{\gamma_0(p)} \frac{\gamma_0(p) - \alpha_0(p)}{\gamma_0(p) + \alpha_0(p)} e^{-2\gamma_0(p)z_1} - \frac{A_2}{T} \frac{\kappa_0^2 \bar{Y}_{20}}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \int_0^\infty \frac{pdp}{\gamma_2(p)} \frac{\gamma_2(p) - \alpha_0(p)}{\gamma_2(p) + \alpha_0(p)} e^{-2\gamma_2(p)z_1}, \quad (5.3)$$

$$h_{220}^+(z_1) = \frac{A_2}{T} \frac{\gamma_0^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \int_0^\infty \frac{pdp}{\gamma_0(p)} \frac{\gamma_0(p) - \alpha_0(p)}{\gamma_0(p) + \alpha_0(p)} e^{-2\gamma_0(p)z_1} - \frac{A_2}{T} \frac{\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \int_0^\infty \frac{pdp}{\gamma_2(p)} \frac{\gamma_2(p) - \alpha_0(p)}{\gamma_2(p) + \alpha_0(p)} e^{-2\gamma_2(p)z_1}, \quad (5.4)$$

Для вкладу парних кореляцій у профіль густини числа частинок подібно як для парної кореляційної функції запишемо:

$$h^+(z_1, \Omega_1) = h_{000}^+(z_1) + 2 h_{200}^+(z_1) Y_{20}(\Omega_1) + h_{220}^+(z_1) |Y_{20}(\Omega_1)|^2. \quad (5.5)$$

Аналогічно як і в ізотропному випадку, унарна функція

$$\rho(z_1, \Omega_1) = \rho f(\Omega_1) \left[ 1 + \frac{h(z_1, \Omega_1)}{2} + \frac{2\pi\rho}{T} \int_0^\infty dz_2 \int_0^\infty ds ds' \int f(\Omega_2) d\Omega_2 \times \left\{ \Phi_0(\sqrt{s^2 + z_{12}^2}) + \Phi_2(\Omega_1 \Omega_2, \sqrt{s^2 + z_{12}^2}) \right\} \right] \quad (5.6)$$

## Додаток

I. Орієнтаційні гармоніки парної кореляційної функції для:

а)  $z_1 > 0, z_2 < 0$

$$h_{000}^{+-}(s_{12}, z_1, z_2) = \quad (Д.1)$$

$$-2 \frac{A_0}{T} \frac{\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \int_0^\infty \frac{J_0(ps_{12})pdp}{\gamma_0(p) + \alpha_0(p)} e^{-\gamma_0(p)z_1 + \alpha_0(p)z_2}$$

$$-2 \frac{A_0}{T} \frac{\gamma_2^2 - \kappa_2^2 \bar{Y}_{20}^2 - \alpha_0^2}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \int_0^\infty \frac{J_0(ps_{12})pdp}{\gamma_2(p) + \alpha_0(p)} e^{-\gamma_2(p)z_1 + \alpha_0(p)z_2},$$

$$h_{200}^{+-}(s_{12}, z_1, z_2) = \quad (Д.2)$$

$$-2 \frac{A_0}{T} \frac{\kappa_2^2 \bar{Y}_{20}}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \int_0^\infty \frac{J_0(ps_{12})pdp}{\gamma_2(p) + \alpha_0(p)} e^{-\gamma_2(p)z_1 + \alpha_0(p)z_2}$$

$$+2 \frac{A_0}{T} \frac{\kappa_2^2 \bar{Y}_{20}}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \int_0^\infty \frac{J_0(ps_{12})pdp}{\gamma_0(p) + \alpha_0(p)} e^{-\gamma_0(p)z_1 + \alpha_0(p)z_2},$$

$$h_{020}^{+-}(s_{12}, z_1, z_2) = \quad (Д.3)$$

$$2 \frac{A_2}{T} \frac{\kappa_0^2 \bar{Y}_{20}}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \int_0^\infty \frac{J_0(ps_{12})pdp}{\gamma_0(p) + \alpha_0(p)} e^{-\gamma_0(p)z_1 + \alpha_0(p)z_2}$$

$$-2 \frac{A_2}{T} \frac{\kappa_0^2 \bar{Y}_{20}}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \int_0^\infty \frac{J_0(ps_{12})pdp}{\gamma_2(p) + \alpha_0(p)} e^{-\gamma_2(p)z_1 + \alpha_0(p)z_2},$$

$$h_{220}^{+-}(s_{12}, z_1, z_2) = \quad (Д.4)$$

$$-2 \frac{A_2}{T} \frac{\gamma_2^2 - \kappa_2^2 \bar{Y}_{20}^2 - \alpha_0^2}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \int_0^\infty \frac{J_0(ps_{12})pdp}{\gamma_0(p) + \alpha_0(p)} e^{-\gamma_0(p)z_1 + \alpha_0(p)z_2}$$

$$-2 \frac{A_2}{T} \frac{\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \int_0^\infty \frac{J_0(ps_{12})pdp}{\gamma_2(p) + \alpha_0(p)} e^{-\gamma_2(p)z_1 + \alpha_0(p)z_2}.$$

б)  $z_1 < 0, z_2 > 0$

$$h_{000}^{-+}(s_{12}, z_1, z_2) = \quad (Д.5)$$

$$2 \frac{A_0}{T} \frac{\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \int_0^\infty \frac{J_0(ps_{12})pdp}{\gamma_0(p) + \alpha_0(p)} e^{-\gamma_0(p)z_2 + \alpha_0(p)z_1}$$

$$+2 \frac{A_0}{T} \frac{\gamma_2^2 - \kappa_2^2 \bar{Y}_{20}^2 - \alpha_0^2}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \int_0^\infty \frac{J_0(ps_{12})pdp}{\gamma_2(p) + \alpha_0(p)} e^{-\gamma_2(p)z_2 + \alpha_0(p)z_1},$$

$$h_{200}^{-+}(s_{12}, z_1, z_2) = \quad (Д.6)$$

$$2 \frac{A_0}{T} \frac{\kappa_2^2 \bar{Y}_{20}}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \int_0^\infty \frac{J_0(ps_{12})pdp}{\gamma_2(p) + \alpha_0(p)} e^{-\gamma_2(p)z_2 + \alpha_0(p)z_1}$$

$$-2 \frac{A_0}{T} \frac{\kappa_2^2 \bar{Y}_{20}}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \int_0^\infty \frac{J_0(ps_{12})pdp}{\gamma_0(p) + \alpha_0(p)} e^{-\gamma_0(p)z_2 + \alpha_0(p)z_1},$$

$$h_{020}^{-+}(s_{12}, z_1, z_2) = \quad (Д.7)$$

$$-2 \frac{A_2}{T} \frac{\kappa_0^2 \bar{Y}_{20}}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \int_0^\infty \frac{J_0(ps_{12})pdp}{\gamma_0(p) + \alpha_0(p)} e^{-\gamma_0(p)z_2 + \alpha_0(p)z_1}$$

$$+2 \frac{A_2}{T} \frac{\kappa_0^2 \bar{Y}_{20}}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \int_0^\infty \frac{J_0(ps_{12})pdp}{\gamma_2(p) + \alpha_0(p)} e^{-\gamma_2(p)z_2 + \alpha_0(p)z_1},$$

$$h_{220}^{-+}(s_{12}, z_1, z_2) = \quad (Д.8)$$

$$2 \frac{A_2}{T} \frac{\gamma_2^2 - \kappa_2^2 \bar{Y}_{20}^2 - \alpha_0^2}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \int_0^\infty \frac{J_0(ps_{12})pdp}{\gamma_0(p) + \alpha_0(p)} e^{-\gamma_0(p)z_2 + \alpha_0(p)z_1}$$

$$+2 \frac{A_2}{T} \frac{\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \int_0^\infty \frac{J_0(ps_{12})pdp}{\gamma_2(p) + \alpha_0(p)} e^{-\gamma_2(p)z_2 + \alpha_0(p)z_1}.$$

в)  $z_1 < 0, z_2 < 0$

$$h_{000}^{\bar{-}}(s_{12}, z_1, z_2) = -\frac{A_0}{T} \frac{\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \int_0^\infty \frac{J_0(p s_{12}) p dp}{\alpha_0(p)} \quad (\text{Д.9})$$

$$\left\{ e^{-\alpha_0(p)|z_1 - z_2|} - \frac{\gamma_0(p) - \alpha_0(p)}{\gamma_0(p) + \alpha_0(p)} e^{\alpha_0(p)} (z_1 + z_2) \right\} \\ - \frac{A_0}{T} \frac{\gamma_2^2 - \kappa_2^2 \bar{Y}_{20}^2 - \alpha_0^2}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \int_0^\infty \frac{J_0(p s_{12}) p dp}{\alpha_0(p)} \\ \left\{ e^{-\alpha_0(p)|z_1 - z_2|} - \frac{\gamma_2(p) - \alpha_0(p)}{\gamma_2(p) + \alpha_0(p)} e^{\alpha_0(p)} (z_1 + z_2) \right\},$$

$$h_{200}^{\bar{-}}(s_{12}, z_1, z_2) = -\frac{A_0}{T} \frac{\kappa_2^2 \bar{Y}_{20}}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \int_0^\infty J_0(p s_{12}) p dp \quad (\text{Д.10})$$

$$\frac{1}{\alpha_0(p)} \left\{ \frac{\gamma_2(p) - \alpha_0(p)}{\gamma_2(p) + \alpha_0(p)} - \frac{\gamma_0(p) - \alpha_0(p)}{\gamma_0(p) + \alpha_0(p)} \right\} e^{\alpha_0(p)} (z_1 + z_2),$$

$$h_{020}^{\bar{-}}(s_{12}, z_1, z_2) = -\frac{A_2}{T} \frac{\kappa_0^2 \bar{Y}_{20}}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \int_0^\infty J_0(p s_{12}) p dp \quad (\text{Д.11})$$

$$\frac{1}{\alpha_0(p)} \left\{ \frac{\gamma_2(p) - \alpha_0(p)}{\gamma_2(p) + \alpha_0(p)} - \frac{\gamma_0(p) - \alpha_0(p)}{\gamma_0(p) + \alpha_0(p)} \right\} e^{\alpha_0(p)} (z_1 + z_2),$$

$$h_{220}^{\bar{-}}(s_{12}, z_1, z_2) = \frac{A_2}{T} \frac{\gamma_2^2 - \kappa_2^2 \bar{Y}_{20}^2 - \alpha_0^2}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \int_0^\infty J_0(p s_{12}) p dp \quad (\text{Д.12})$$

$$\left\{ \frac{1}{\alpha_0(p)} e^{-\alpha_0(p)|z_1 - z_2|} - \frac{1}{\alpha_0(p)} \frac{\gamma_0(p) - \alpha_0(p)}{\gamma_0(p) + \alpha_0(p)} e^{\alpha_0(p)} (z_1 + z_2) \right\} \\ + \frac{A_2}{T} \frac{\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \int_0^\infty J_0(p s_{12}) p dp \\ \left\{ \frac{1}{\alpha_0(p)} e^{-\alpha_0(p)|z_1 - z_2|} - \frac{1}{\alpha_0(p)} \frac{\gamma_2(p) - \alpha_0(p)}{\gamma_2(p) + \alpha_0(p)} e^{\alpha_0(p)} (z_1 + z_2) \right\}.$$

II. Орієнтаційні гармоніки вкладу парних кореляцій у профіль густини числа частинок для  $z_1 < 0$ :

$$h_{000}^{\bar{-}}(z_1) = \frac{A_0}{T} \frac{\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \int_0^\infty \frac{p dp}{\alpha_0(p)} \frac{\gamma_0(p) - \alpha_0(p)}{\gamma_0(p) + \alpha_0(p)} e^{2\alpha_0(p) z_1} \\ - \frac{A_0}{T} \frac{\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \int_0^\infty \frac{p dp}{\alpha_0(p)} \frac{\gamma_2(p) - \alpha_0(p)}{\gamma_2(p) + \alpha_0(p)} e^{2\alpha_0(p) z_1}, \quad (\text{Д.13})$$

$$h_{200}^{\bar{-}}(z_1) = -\frac{A_0}{T} \frac{\kappa_2^2 \bar{Y}_{20}}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \int_0^\infty p dp \quad (\text{Д.14})$$

$$\frac{1}{\alpha_0(p)} \left\{ \frac{\gamma_2(p) - \alpha_0(p)}{\gamma_2(p) + \alpha_0(p)} - \frac{\gamma_0(p) - \alpha_0(p)}{\gamma_0(p) + \alpha_0(p)} \right\} e^{2\alpha_0(p) z_1},$$

$$h_{020}^{\bar{-}}(z_1) = -\frac{A_2}{T} \frac{\kappa_0^2 \bar{Y}_{20}}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \int_0^\infty p dp \quad (\text{Д.15})$$

$$\frac{1}{\alpha_0(p)} \left\{ \frac{\gamma_2(p) - \alpha_0(p)}{\gamma_2(p) + \alpha_0(p)} - \frac{\gamma_0(p) - \alpha_0(p)}{\gamma_0(p) + \alpha_0(p)} \right\} e^{2\alpha_0(p) z_1},$$

$$h_{220}^{\bar{-}}(z_1) = \frac{A_2}{T} \frac{\gamma_0^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \int_0^\infty \frac{p dp}{\alpha_0(p)} \frac{\gamma_0(p) - \alpha_0(p)}{\gamma_0(p) + \alpha_0(p)} e^{2\alpha_0(p) z_1} \\ - \frac{A_2}{T} \frac{\gamma_2^2 - \kappa_0^2 - \alpha_0^2}{\gamma_2^2 - \gamma_0^2} \int_0^\infty \frac{p dp}{\alpha_0(p)} \frac{\gamma_2(p) - \alpha_0(p)}{\gamma_2(p) + \alpha_0(p)} e^{2\alpha_0(p) z_1}. \quad (\text{Д.16})$$



## Література

1. Henderson D., Abraham F.F., Barker J.A.. Mol.Phys. **31**, No 4, 1976, P.1291-1295.
  2. Юхновский И.Р., Головка М.Ф. Статистическая теория классических равновесных систем. Наукова думка, Киев, 1980, 372 с.
  3. M.F. Golovko, I.R. Yukhnovsky. In Chem. Phys. Solvation, Part A. Elsevier, Amsterdam. Chapt. 6 1985, P.207-262.
  4. M.F. Holovko, E.M. Sovyak. Cond.Matter.Phys. **6**, 1995, P.49-77.
  5. Henderson D., Blum L., Lebowitz J.L.. Electroanal.Chem. **102**, 315 1979.
  6. M.F. Holovko. In Ionic Soft Matter: Modern Trends in Theory and Applications ed. by D. Henderson, M. Holovko, A. Trokhymchuk, Springer, 2005, P.45-81.
  7. M.F. Holovko, I.Y. Kravtsiv, E.M. Sovyak. Cond.Matter.Phys. **12**, No 2, 2009, P.137-150.
  8. T.G. Sokolovska, R.O. Sokolovskii, G.N. Patey. J.Chem.Phys. **122**, 034703, 2005.
  9. T.G. Sokolovska, R.O. Sokolovskii, G.N. Patey. Phys.Rev.Let. **92**, No 18, 185508, 2004.
  10. M.F. Holovko, T.G. Sokolovska. J.Mol.Liq. **82**, 161, 1999.
  11. Юхновский И.Р., Головка М.Ф., Совьяк Е.Н. Экранированные потенциалы пространственно-неоднородных ионно-молекулярных систем. Общая методика решения. Препринт ИТФ-82-159, 1982, 18с.; див. також І.Р. Юхновський. Вибрані праці.Фізика, Національний Університет „Львівська політехніка”, Львів, 2005, с. 366-375.
  12. W. Maier, A. Saupe, Z. Naturforsch. A13, 564 (1958); A14, 882 (1959); A15, 287 (1960).
  13. P.G. de Gennes. The physics of liquid crystals. Oxford university press, 1974.
  14. Юхновский И.Р., Головка М.Ф., Курьяк И.Й., Совьяк Е.Н. Физика молекул, Наукова думка, Киев, 1981, №10, с.26-43.
  15. Курьяк И.Й., Юхновский И.Р. ТМФ, **52**, №1, 1982, с.114-126.
  16. Ф.Д. Гахов, Ю.И. Черский. Уравнения типа свертки, М., „Наука”, 1978, 296 с.
  17. Мусхелишвили Н.И. Сингулярные интегральные уравнения. М., „Наука”, 1968, 600 с.
  18. Ф.П. Гантмахер. Теория матриц. М., „Наука”, 1966, 576 с.
-

# CONDENSED MATTER PHYSICS

The journal **Condensed Matter Physics** is founded in 1993 and published by Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine.

**AIMS AND SCOPE:** The journal **Condensed Matter Physics** contains research and review articles in the field of statistical mechanics and condensed matter theory. The main attention is paid to physics of solid, liquid and amorphous systems, phase equilibria and phase transitions, thermal, structural, electric, magnetic and optical properties of condensed matter. Condensed Matter Physics is published quarterly.

---

**ABSTRACTED/INDEXED IN:**

- Chemical Abstract Service, Current Contents/Physical, Chemical&Earth Sciences
- ISI Science Citation Index-Expanded, ISI Alerting Services
- INSPEC
- Elsevier Bibliographic Databases (EMBASE, EMNursing, Compendex, GEOBASE, Scopus)
- "Referativnyi Zhurnal"
- "Dzherelo"

---

**EDITOR IN CHIEF:** Ihor Yukhnovskii

**EDITORIAL BOARD:** T. Arimitsu, *Tsukuba*; J.-P. Badiali, *Paris*; B. Berche, *Nancy*; T. Bryk, *Lviv*; J.-M. Caillol, *Orsay*; C. von Ferber, *Freiburg*; R. Folk, *Linz*; D. Henderson, *Provo*; F. Hirata, *Okazaki*; Yu. Holovatch, *Lviv*; M. Holovko, *Lviv*; O. Ivankiv, *Lviv*; W. Janke, *Leipzig*; M. Korynevskii, *Lviv*; Yu. Kozitsky, *Lublin*; M. Kozlovskii, *Lviv*; H. Krienke, *Regensburg*; R. Levitskii, *Lviv*; V. Morozov, *Moscow*; I. Mryglod, *Lviv*; O. Patsahan (Assistant Editor), *Lviv*; N. Plakida, *Dubna*; G. Röpke, *Rostock*; I. Stasyuk (Associate Editor), *Lviv*; M. Tokarchuk, *Lviv*; I. Vakarchuk, *Lviv*; M. Vavruk, *Lviv*; A. Zagorodny, *Kyiv*

**CONTACT INFORMATION:**

Institute for Condensed Matter Physics  
of the National Academy of Sciences of Ukraine  
1 Svientsitskii Str., 79011 Lviv, Ukraine  
Tel: +38(032)2760908; Fax: +38(032)2761978  
E-mail: cmp@icmp.lviv.ua    <http://www.icmp.lviv.ua>