Crossref
DOI: 10.31643/2020/6445.13
УДК 669.432.669.046.42
МРНТИ 53.37.91

Реттелмеген жүйелердегі корреляция

Шаихова Г. С., Әділбек Н., Ахметов Қ. М., Журов В. В., Шегебаева Г. Е.

Received: 13 April 2020 / Peer reviewed: 20 April 2020 / Accepted: 28 April 2020

Түйіндеме. Бұл мақалада сұйық металдар динамикасының теориялық аспектілері және реттелмеген жүйелердегі корреляция мәселелері қарастырылады. Зерттеудің мақсаты: таңдалған элементтермен Марков теңдеулерінің алыс әсер ететін құрамдауыштарын аппроксимациялау. Жұмыста айнымалыларды таңдау кезінде Марков процестерінің теңдеуін аппроксимацияның осындай түріне келтіру қажет екені көрсетілген, онда таңдалған айнымалылардың арасында алыс әсер ететін құрамдастар бар. Алайда, мұндай таңдау тұрақты айнымалыларды да қамтуы тиіс. Көптеген зерттеулер көрсеткендей, таңдау динамикалық айнымалылары бар қозғалыстың бастапқы теңдеуінде жүзеге асырылуы мүмкін емес, ол үшін есте сақтау функциясын талдау қажет. Жоғары ретті есте сақтау функциясы жылдам кемуі мүмкін және нәтижесінде таңдалған элементтермен Марков теңдеулерінің алысқа әсер ететін құрамдастарын аппроксимациялауға болады. Жұмыста автокорреляциялық функцияның Фурье түрленуі мен динамикалық қабылдағыштықтың жорамал бөлігі арасындағы байланысты белгілейтін флуктуациялық-диссипациялық теорема дәлелденген.
Түйін сөздер: корреляция, Фурье түрлендіру, Броун қозғалысы, Марков теңдеуі, ретсіз жүйе, динамикалық айнымалылар, флуктуация, флуктуациялық-диссипациялық теорема.

Information about the authors / Авторлар туралы ақпарат:
Shaikhova G. C. - Dr of Tech. Sc., Ass. Prof., Karaganda State Technical University, Kazakhstan. ORCID ID0000-0002-2036-3023. E-mail: shaikxova_2011@mail.ru; **Adilbek N.** - Dr of Tech. Sc., Ass. Prof., Karaganda State Technical University, Kazakhstan. ORCID ID 0000-0003-2189-1351. E-mail: a.nursagat2017@mail.ru; **Akhmetov K. M**. - Dr of Tech. Sc., Ass. Prof., Karaganda State Technical University, Kazakhstan. ORCID ID: 0000-0002-2144-5602. E-mail: akhmetov_kabiden@mail.ru; **Zhurov V. V.** - Dr of Tech. Sc., Ass. Prof., Karaganda State Technical University, Kazakhstan. ORCID ID: 0000-0002-4413-8584. E-mail: zhurvitv@yandex.ru; **Shegebayev G. E.** - MA, Karaganda State Technical University, Kazakhstan. ORCID ID: 0000-0002-6394-678X. E-mail: shegebaevagaukhar@yandex.ru

Шаихова Г. С – тех. ғыл. канд., доцент, Қарағанды мемлекеттік техникалық университеті, Қазақстан. ORCID ID0000-0002-2036-3023. E-mail: shaikxova_2011@mail.ru; **Әділбек Н.** - тех. ғыл. канд., доцент, Қарағанды мемлекеттік техникалық университеті, Қазақстан. ORCID ID0000-0003-2189-1351. E-mail:a.nursagat2017@mail.ru; **Ахметов Қ. М.** - тех. ғыл. канд., доцент, Қарағанды мемлекеттік техникалық университеті, Қазақстан. ORCID ID: 0000-0002-2144-5602. E-mail: akhmetov_kabiden@mail.ru; **Журов В. В.** - тех. ғыл. канд., доцент,Қарағанды мемлекеттік техникалық университеті, Қазақстан. ORCID ID: 0000-0002-4413-8584. E-mail: zhurvitv@yandex.ru; **Шегебаева Г. Е.** - жаратылыстану ғылымдарының магистрі, Қарағанды мемлекеттік техникалық университеті, Қазақстан. ORCID ID: 0000-0002-6394-678X. E-mail: shegebaevagaukhar@yandex.ru

Кіріспе

Жартылай өткізгіштер металдарының балқытпалары кристалл денелермен салыстырғанда заттардың жеткіліксіз зерделенген класын білдіреді. Балқытпалардың физикалық табиғаты оларды молекулалық сұйықтықтар мен аморфты денелер сияқты заттардың бірнеше басқа кластары арасында аралық орынға қояды. Алайда осы заттар арасындағы шекараны анықтау қиынға соғады.

Флуктуация-диссипациялық теорема қабылдағыштықты жүйенің тепе-тең күйдегі қасиеттерінің флуктуациялары арқылы өрнектеуге мүмкіндік береді, олар уақытқа тәуелді тығыздық сияқты корреляциялық функциялармен байланысқан. Бұдан басқа, қабылдағыштық экспериментте бақыланатын шама болып табылады. Мұнда біз когерентті шашырау бойынша эксперименттерді еске аламыз. Дәл осы функция ақпаратты болып табылады және жүйенің барлық күйлерімен, атомдардың тығыздығымен және олардың жылдамдықтарымен сипатталады. Осы міндетті шешу үшін бөлшектер тығыздығы мен импульс ағынының тығыздығынан қосылатын, динамикалық шамалардың жинағын енгізу қажет.

Балқытпалардағы атомдық процестердің уақыт пен кеңістіктегі ұзақтығының тәртібі оларды макроскопиялық және микроскопиялық масштабтарға бөлуге мүмкіндік береді. Ал бұл кеңістік-уақыттық масштабтарды таңдауға мүмкіндік береді. Яғни, балқытпаның қасиеттерін оны біз макроскопиялық масштабқа жатқызатын тұтас ретінде анықтайтын процестерді атап көрсету қажет. Оған сондай-ақ диффузия процестері, дыбыстың өшуі, жылу өткізгіштік және т.б. жатқызылады. Бір атомды сұйықтықтағы ауытқуды екі бөлікке, біріншіден, қысым флуктуациясына, екіншіден, энтропия флуктуациясына бөлуге болады.

Талқылау нәтижесі

Ал микроскопиялық масштаб туралы айтсақ, онда ол флуктуацияның пайда болуымен қоса жүретін релаксациялық процестерді сипаттайды, олардың арасында төңіректік тепе-тең күйге ауысу процесі аса маңызды болып табылады. Мұндай процеске сәйкес келетін релаксация уақыты, олардан бастап жүйе тұрақты жылу өткізгіштік мен тұтқырлық болғанда макроскопиялық айнымалылармен сипатталуы мүмкін. Мұндай уақытты бағалауды

Максвеллдік релаксация уақытының $\tau_k = \dfrac{\eta_1}{G}$

көмегімен жүзеге асыруға болады, мұнда *G* – ығысу модулі, оның балқытпа мен қатты дене үшін реті балқу нүктесінде сол және бір. Алайда айналмалы және ішкі еркіндік дәрежелері бар балқытпа үшін мұндай бағалау дұрыс емес [1, 2, 9]. Динамикалық компьютерлік эксперименттерде басқа микроскопиялық уақыт масштабы бар болады және ол қоршаған сол және бір жақын көршілерді сақтаумен байланысқан. Тепе-теңдікте болатын зерттелетін балқытпаға уақытқа аз тәуелді болатын ауытқу әсер ететін болсын. $t = -\infty$ уақыт моментінде жүйе тепе-теңдікте болды, сонымен бірге H гамильтонианымен сипатталады. t уақыт моменті арқылы оның гамильтонианы $H - \beta g(t)$ өзгерді, мұнда β - қоса берілетін *g(t)* ауытқуымен байланысты, қандай да бір өзгерген шама. Онда жүйе реакциясы динамикалық айнымалымен сипатталатын болады, оны келесі аналитикалық түрде беруге болады:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \hat{O}_{AB}(t-\bar{t})\, g(\bar{t})\, d\bar{t} \,,$$

мұнда $\hat{O}_{AB}(t)$ - жүйе реакциясы.

Егер *g(t)* функциясын мына түрде берсек:

$$g(t) \sim \exp(\varepsilon t)\cos(\omega t) g \,,$$

мұнда $t = -\infty$ $g(t) \Rightarrow 0$ болғанда $\varepsilon > 0$, онда *t*уақыт моментінде ауытқымен тудырылған күйдің өзгеруі былай жазылады:

$$g R_e[\exp(-\omega t)\chi_{AB}(\omega)] .$$

Және де:

$$\chi_{AB}(\omega) = \lim_{\varepsilon \to 0} \int_0^{\infty} dt \exp(i\omega t - \varepsilon t)\hat{O}_{AB}(t) \,,$$

динамикалық қабылдағыштық болып табылады. [1,2, 7]жұмыстарда көрсетілгендей,

$$\hat{O}_{AB}(t) = -\beta < AB^* > \frac{\partial}{\partial t}\hat{O}_{AB}(t) \,,$$

$$< AB^* > \hat{O}_{AB}(t) = < A(t)B^*(0) > = < A(0)B^*(t) >$$

есепке алғанда, лаплас түрлендіруін пайдаланып, былай жазамыз:

$$\chi_{AB}(\omega) = \beta < AB^* > (1 + i\omega \tilde{\hat{O}}_{AB}(i\omega)) \,.$$

Онда автокорреляциялық функцияның Фурье түрлендіруі және динамикалық қабылдағыштықтың жорамал бөлігі арасындағы байланыс келесі түрде жазылады:

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(i\omega t) < A(t)A^* > = \frac{< AA^* >}{\pi} \mathrm{Re}\,\tilde{\hat{O}}_{AB}(\omega) = \frac{1}{\pi\omega\beta} J_m X_{AA}(\omega)$$

және флуктуация-диссипациялық теоремасының нәтижесін білдіреді. Бұл өрнек жүйенің флуктуациялық қасиеттерін жүйенің сыртқы өзара әрекеттесуге реакциясымен байланыстырады. Мысалы, *A* ретінде бөлшектердің флуктуациялық тығыздығын таңдасақ:

$$n_k = \sum_j [\exp(ikR_j - \delta_{k,o})] \,,$$

Онда когеренттік шашырау функциясы мен динамикалық қабылдағыштық арасындағы байланысты алуға болады.

Уақыт бойынша өзгеретін сыртқы өрісте Nбөлшектер болсын, онда жүйеде қайтымсыз процестер жүруі мүмкін, бірақ қайтымды процестер де жүруі мүмкін. Соңғыға балқытылған жүйенің сыртқы өрісте полярлануын тудыратын, икемді деформация процестері жатады. Әрине, егер өрістің әсері айтарлықтай аз болса, онда жүйе реакциясын сызықтық деп есептеуге болады.

Сызықтылық шарттары сыртқы потенциалды тәуелсіз гармоникаларға жіктеуге мүмкіндік береді. Онда k – кеңістігінде $\hat{O}(k,\omega)$ Фурье-компонентінмына түрде беруге болады:

$$\hat{O}(R,t)=\frac{1}{2\pi}\sum_{l=1}^{N}\sum_{k}\int\hat{O}(k,\omega)\exp[-i(kR_e+\omega t)]d\omega \cdot \quad (1)$$

n_k - бөлшектер тығыздығының Фурье-компоненті және ол мынаған болғандықтан:

$$\eta_k=\sum_{n=1}^{N}\exp\left[-ikR_e\right],$$

онда (1) өрнегі былай жазылады:

$$\hat{O}(R,t)=\frac{1}{2\pi}\sum_{k}\int\hat{O}(k,\omega)\exp(-i\omega t)d\omega .$$

Соңғы ара қатыс бізді әрбір Фурье-компоненті басқа компоненттерге тәуелсіз тығыздық флуктуациясын тудырады және бұлфлуктуациялар жиілігі ω толқындық вектормен анықталады деген ойға итермелейді. Басқаша айтқанда, бір Фурье-компонентімен тудырылатын ауытқу [3,4, 8]:

$$n_k\hat{O}(k,\omega)\exp(-i\omega t) , (2)$$

қума толқынды білдіреді. Процессадиабаталық болып көрінетіндіктен және ауытқу $\exp(\varepsilon t)$ түрінде болатындықтан, онда (2) түріндегі өрнек былай жазылады:

$$n_k\hat{O}(k,\omega)\exp(\varepsilon-i\omega)t .$$

Бұл жағдайларда tуақыт моментіндегі жүйенің орташа тығыздықты флуктуациясын δ_n байқауға болады, бұл келесі түрде берілуі мүмкін:

$$<\delta_n(k,t)>=<\delta_n(k,\omega)\exp[(t\varepsilon-i\omega)t]> .$$

$<\delta_n(k,t)>$ Фурье-компонентін жүйереакциясы ретінде көрсетуге болады. Бұдан басқа, жүйенің динамикалық қабылдағыштығын енгізуге болады:

$$\tilde{A}(k,\omega)=\frac{<\delta_n(k,\omega)>}{\hat{O}(k,\omega)},$$

мұнда $\tilde{A}(k,\omega)$ кешендіфункция болып табылады, және де оның жорамал бөлігі толқындық векторы k жиілікпен өріспен тасымалданатын,энергия жүйесіне берудің тұрақты процесін сипаттайды. Сөйтіп, флуктуация-диссипациялық теорема $\rho(k,\omega)$ спектрлік функциясымен байланысты береді.

Жүйе шекараларының адиабаталылығы шарты кешенді жиіліктің нақты жиілігін ауыстырумен тепе-тең. Математикалық түрде сыртқы өріс уақытындағы өзгерістерді сипаттайтын жиілік нақты оське шексіз жақын Z жоғарғы жартылай жазықтығында жатыр деп анықтауға болады. Сонымен бірге динамикалық қабылдағыштық $\tilde{A}(k,\omega)$ жиіліктердің жартылай жазықтығына аналитикалық түрде жалғасуы мүмкін. Көп бөлшекті жүйенің тепе-тең күйінің уақытқа тәуелсіз ұжымдық модаларына төменгі Z кешенді жартылай жазықтығының $\tilde{A}(k,z)$ полюстері жауап беретін болады. Аналитикалық жалғастыруларда олардың нақты, сондай-ақ жорамал бөлігінің айырымдары $\tilde{A}(k,\omega)$ сияқты полюстері болады. Сондай-ақ $\rho(k,\omega)$ шашырау функциясының да полюстері болады, ол флуктуация-диссипациялық теоремаға сәйкес тығыздық реакциясы функциясының жорамал бөлігімен байланысқан. Енді қарастырылған ережелердің негізінде, динамикалық айнымалыларды ортогональ базис бойынша жіктейміз. Қандай да бір $A(t)$ шамасы қозғалыс теңдеуіне сәйкес эволюцияланатын болсын:

$$\frac{dA(t)}{dt}=iL_0A(t) ,$$

мұнда L_0 - Лиувилль операторын білдіреді, $iL_0A(t)$ - A айнымалысы гамильтонианы бар Пуассонның классикалық жақшалары. Қандай да бір F и G және F^*, G^* операторлары, олардың эрмиттік түйіндестері берілген болсын, онда Лиувилль операторы эрмиттік деген жорамалда былай жазуға болады:

$$(L_0,F,G^*)=(F,[L_0,G]^*).$$

Мұндай көбейтіндіні интеграл түрінде беруге болады:

$$(F,G^*)=\frac{1}{\beta}\int^{\beta}<\exp(\lambda H)F-\exp(-\lambda H)G^*>d\lambda,$$

мұнда<….>жүйесінің H гамильтонианы - температурасы $T=\frac{1}{k_{\hat{A}}\cdot\beta}$ канондықансамбль

орташалау. Нақтылы <….> жақшасының корреляциялық функцияны білдіретінін атап кету керек, ол келесі параграфтарда нақты қарастырылатын болады. Қандай да бір *A* шамасы *t* уақытына тәуелді болады деп жорамалдайық және *t = 0* уақыт моментінде Гильберт кеңістігінде вектор болып табылатын болсын. Онда *G* векторының *A(0)*-ға проекциясы былай көрсетілуі мүмкін:

$$P_0G=(G,A^*)(A,A^*)^{-1}A,$$

мұнда P_0 - сызықтық эрмиттік оператор.
Сонымен бірге былай жазуға болады:

$$A(t)=\hat{O}_0(t)A+A(t), \quad (3)$$

$$\hat{O}_0(t)=(A(t),A^*)(A,A^*)^{-1},$$

мұнда

$$A(t)=(1-P_0)A(t),$$

онда (3) пайдаланып, $A(t)$ өрнегін табуға болады:

$$A(t)-L_1A(t)=\hat{O}_0(t)f_1,$$

мұнда

$$f_1=iL_1A, \qquad L_1=(1-P_0)Z_0.$$

Интегралды алған соң:

$$A(t)=\int_0^t\hat{O}(s)f_1(t-\rho)d\rho,$$

мұнда

$$f_1(t)=\exp(iL_1t)f_1$$

$\hat{A}(t)$ -ның $\hat{O}_0(t)$ және $f_1(t)$ үйірткісі болып табылатынын көреміз, басқаша айтқанда, Лапластың соңғы түрлендіруін аламыз:

$$A(z)=\int_0^{\infty}A(t)\exp(-zt)dt=\hat{O}_0(z)[A+f_1(z)],$$

($f_1=iL_1A$) есепке алып, былай қорытындылауға болады:

$$(f_1(t)A^*)=0,$$

Сондықтан оның эволюциясы мына теңдеуге бағынады деп санауға болады:

$$f_1(t)=iL_1f_1(t).$$

Сөйтіп, $f_1(t)$ функциясы f_1 векторына қатысты проекциялық және ортогональ құраушыларға бөлінеді, немесе

$$f_1(t)=\hat{O}_1(t)f_1+f_1(t),$$

мұнда

$$\hat{O}_1(t)=(f_1(t),f_1^*)(f_1,f_1^*)^{-1},$$

$$f_1(t)=(1-P_1)f_1(t)\ \ L_j=(t-P_j)L_{j-1},$$

мұнда, P_1 - f_1 осіне проекциялық оператор. $(1-P_1)$ операторының амалы келесі ара қатысты береді:

$$f_1(z)=\hat{O}_1(z)[f_1+f_2(z)],$$

мұнда

$$f_2(z)=\exp(iL_2t)iL_2f_1,$$

$$L_2=(1-P_2)L_1.$$

Сөйтіп, f_1(z) - f_2 осіне f_1 ортогональкқұраушы болып табылады, бұдан A, f және f_2 бір-біріне қатысты ортогональ екені шығады.

Мұндай процедураны жалғастырып, келесі тізбекті теңдеуді алуға болады:

$$f_j(t)=\exp(iL_jt)iL_jf_{j-1},$$

$$f_o(t)=A(t),$$

мұнда P_j - f_j осіне проекциялық оператор.
Бұдан басқа мына ара қатысты шығаруға

болады:

$$f_j(t)=\Phi_j(t)f_j+\int_0^t \Phi_j(S)f_j+1(t-S)dS$$

$$\hat{O}_j(t)=(f_j(t),f_j{}^*)(f_j,f_j{}^*)^{-1},$$

Лаплас түрлендіруін пайдаланып, мынаны аламыз:

$$f_j(z)=\hat{O}_j(z)[f_j+f_{j+1}(z)],$$

Сонеымен бірге L_j келесі формула бойынша беруге болады:

$$L_j=\prod_{i=0}^{j-1}(1-P_i)L_0=[1-\sum_{i=0}^{j-1}\mathrm{P}]L_0,$$

Сондықтан $\{f_j\}$ жинағы, мұнда j = 0,1,2,…, *n*ортогональбазисті құрайды. Басқа айтқанда:

$$\{f_j(t),f_i{}^*\}=0,\ i=0,1,2,\dots,j-1.$$

Сөйтіп, $A(t)$ функциясының кері түрлендіруі мына түрде болады:

$$A(t)=\sum_{j=0}^{n-1}c_j(t)f_j+\int_0^t c_{n-1}(t-S)f_n(S)dS \quad (4)$$

мұнда жіктеу коэффициенттері былай анықталады:

$$c_j(t)=\hat{O}_0(t)\hat{O}_1(t)\hat{O}_2(t)..\hat{O}_j(t),$$

немесе интегралдық түрде:

$$c_j(t)=\int_0^1 dt_1\Phi(t-t_1)\times\ldots\times\int_0^{t_j-1} dt_j\Phi_{j-1}(t_{j-1}-t_j)$$

Соңғы ара қатыстар сұйықтықтардағы броундық қозғалыстың стохастикалық теориясының маңызды теңдеуінің жалпылауы болып табылады. (4)-өрнек $f_0,f,f_2 \dots f_{n-1}$ базисімен құрылған ішкі кеңістікке $A(t)$ функциясының проекциясын сипаттайды және $A(t)$ айнымалысы эволюциясының орташалануы болып табылады. j неғұрлым үлкен болған сайын, $A(t)$ функциясын сипаттау соғұрлым дәлірек болатынын айту керек. Ондағы интегралдық мүшелер орташаланған қозғалыстан болатын флуктуацияны сипаттайды. Флуктуация үшін жауап беретін, $f_n(t)$ шамасы $A(t)$ әсер ететін кездейсоқ күш деп аталады. Жеке жағдайда, $A(t)$ деген балқытпаның броундық бөлшегінің импульсі, ал $f_1(t)$ - осы бөлшекке әсер ететін кездейсоқ күш. Сөйтіп, берілген параграфта жоғарыда айтылған идеялардың барлығы $A_1,A_2,\dots,A_n$ көптеген айнымалылары жағдайында жолдық эрмиттік матрица жалпылануы мүмкін, онда $(A,A^*),\hat{O}_j(t),c_j(t)$ өрнектері квадрат матрицаны білдіреді. P_0 операторы ерікті айнымалыны бастапқы *A* мәніне жобалайды және пропагаторды білдіреді және оның көмегімен айнымалылар сақталатын және флуктациялаушы компоненттерге бөлінеді.

Қорытынды

Айнымалыларды таңдау кезінде Марков процестерінің теңдеуін онда таңдалған айнымалылардың арасында алыстан әсер ететін құраушылары бар болатын жуықтауға әкелуі қажет екенін айту керек. Алайда мұндай таңдауға сақталатын айнымалылар қосылу керек. Көптеген зерттеулер көрсеткендей [5, 6, 7], таңдау динамикалық айнымалылары бар қозғалыстың бастапқы теңдеуі үшін жүзеге асырыла алмайды және [8, 11-14] жұмыста көрсетілгендей, жады функциясын талдау үшін талап етіледі. Онда әрқашан жоғары ретті жады функциясы болады, ол жылдам кемуі мүмкін және ақыр соңында оны қайтадан Марков процестеріне әкелуге болады. [8, 11] жұмыста шексіз үздіксіз бөлшек түрінде аса жоғары ретті жадының осы функцияларын алу алгоритмі келтірілген. Алайда мұнда да кейбір дәлсіздіктер болады, сондай-ақ жуық-таманы алу үшін бұл бөлшекті қай жерде үзуге болатыны белгісіз.

Қорытындысында тұтқыр ортада бөлшектің $V(t)$ жылдамдығымен қозғалуының Марков теңдеуінің негізгі қасиеттерін қарастырамыз. Басқаша айтқанда, бұл теңдеу мына түрде болады:

$$\frac{mdV(t)}{dt}=-\gamma V(t)+f_1(t),$$

мұнда γ - үйкеліс күші, $f_1(t)$ - балқытпа бөлшектерінің қақтығысуы есебінен пайда болатын кездейсоқ күш. Сонымен бірге γ және

$f_1(t)$ ұқсас физикалық табиғаты бар екеніне ерекше көңіл аудару керек. Кездейсоқ күштің орташа мәнінің нөлге тең екені белгілі. Сондай-ақ $f_1(t)$ жылдамдықпен корреляцияланбайды деп айтылады, яғни

$$< f_1(t)V(0) >= 0 .$$

Онда былай жазуға болады:

$$< f_1(t), f_1^* >= const\delta(t) .$$

Егер жүйе тұрақты болса, онда келесі ара қатыс дұрыс болады:

$$< f_1(t), f_1^* >= 2m\gamma\delta(t) ,$$

немесе

$$\gamma = \beta\int_0^\infty dt < f_1(t), f_1^* > .$$

Соңғы формула балқытпа бөлшегіне әсер ететін күштердің тұтқырлық және флуктуациялық құраушыларының өзара байлансын білдіреді.

Аз уақыттар облысында, сондай-ақ бөлшек аралық потенциалдың үздіксіздігі шартынан жіктеу шығады [6, 9, 10].

$$< V(t)V >=< V^2 > (1 - \frac{\Omega^2{}_0 t^2}{2!} + \frac{\Omega^3{}_0 t^3}{3!} + \ldots),$$

мұнда Ω_0 - бөлшек аралық потенциалдың екінші туындысының интегралы болып табылады, оны келесі түрде көрсетуге болады:

$$\Omega_k{}^2 = \frac{n}{m}\int dR \frac{\partial^2 V(R)}{\partial z^2} g(R)\cos kz ,$$

мұнда $g(R)$ - балқытпалардағы атомдардың радиал үлестірімінің функциясы. Марков теңдеуін жалпылап қорыту мақсатында аз уақыттар жағдайында бақыланатын бөлшектің қоршаған атомдарға реакциясын есепке алу қажет, ал ол үшін уақытқа тәуелді болатын үйкеліс күштерін енгізу қажет.

Осы мақалаға сілтеме: Шаихова Г. С, Әділбек Н, Ахметов Қ. М, Журов В. В, Шегебаева Г. Е. Реттелмеген жүйелердегі корреляция // Kompleksnoe Ispol′zovanie Mineral′nogo syr′â/Complex Use of Mineral Resources/Mineraldik Shikisattardy Keshendi Paidalanu, – 2020, – №2 (313), – б. 19-26. https://doi.org/10.31643/2020/6445.13

Cite this article as: Shaikhova G. S, Adilbek N, Akhmetov K. M, Zhurov V. B, Shegebayeva G. E. Rettelmegen jüyelerdegi korrelyacïya [Correlation in Disordered Systems] // Kompleksnoe Ispol′zovanie Mineral′nogo syr′â / Complex Use of Mineral Resources / Mineraldik Shikisattardy Keshendi Paidalanu, - 2020, - №2 (313), - p. 19-26. (In Kazakh). https://doi.org/10.31643/2020/6445.13

Correlation in Disordered Systems

Shaikhova G. S., Adilbek N., Akhmetov K. M, Zhurov V. V., Shegebayeva G. E.

Abstract. In this paper, authors consider the theoretical aspects of the dynamics of liquid metals and the issues of correlations in disordered systems. The goal is to demonstrate that in choosing variables it is necessary to bring the equation of Markov processes to an approximation in which among the selected variables there are long-range components. However, this choice should include persistent variables. In numerous studies it is shown that selection cannot be made for the initial equation of motion with dynamic variables, and memory function analysis is required. As always, it contains a high-order memory function that can quickly decrease, and finally it can be again converted by the Markov process. Ways of simplifying the equation of Markov processes are given. In this work, authors derive the connection between the Fourier transform of the autocorrelation function and the imaginary part of the dynamic susceptibility and the result of the fluctuation-dissipation theorem.

Keywords: correlation, Fourier transform, Brownian motion, Markov equation, disordered system, dynamic variables, fluctuation, fluctuation-dissipation theorem.

Корреляция в разупорядоченных системах

Шаихова Г. С., Әділбек Н., Ахметов К. М., Журов В. В., Шегебаева Г. Е.

Аннотация. В настоящей работе рассматриваются теоретические аспекты динамики жидких металлов и вопросы корреляций в разупорядоченных системах. Цель исследования: аппроксимация дальнодействующими

составляющими марковских уравнений с выбранными элементами. В работе показано, что при выборе переменных необходимо привести уравнение марковских процессов к такому виду аппроксимации, в которой среди выбранных переменных имеются дальнодействующие составляющие. Однако такой выбор должен включать постоянные переменные. Как показывают многочисленные исследования выбор не может быть осуществлен для начального уравнения движения с динамическими переменными, и требуется анализ функции памяти. Известно, функция памяти высокого порядка может быстро убывать и в итоге ее можно аппроксимировать дальнодействующими составляющими марковских уравнений с выбранными элементами. В работе доказана флуктуационно-диссипационная теорема, устанавливающая связь между Фурье преобразованием автокорреляционной функции и мнимой частью динамической восприимчивости.
Ключевые слова: корреляция, преобразование Фурье, Броуновское движение, уравнение Маркова, разупорядоченная система, динамические переменные, флуктуация, флуктуационно-диссипационная теорема.

Әдебиеттер

[1] Asthagiri D., Pratt Lawrence R., Kress J.D. Free energy of liquid water on the basis of quasichemical theory and ab initio molecular dynamics // Phys. Rev. – 2003. -№4. -P.64–68. https://doi.org/10.1103/physreve.68.041505

[2] Alemany M.M.G., Jain Manish, KronikLeeor, Chelikowsky James R. Real-space pseudopotenital method for computing the electronic properties of periodic systems // Phys. Rev. B. – 2004.-№7.- P.64–70. https://doi.org/10.1103/physrevb.69.075101

[3] Шаихова Г.С., Қасымова Л.Ж., . Махметова Г.Ш.. Заттың балқытылған күйінің динамикалық қасиеттері туралы.// Труды университета, Караганда.- 2018.- №1.- С. 36-40.

[4] Васильев А.Н. Метод диагонализации парных корреляционных функций для многокомпонентной жидкой системы // Теор. и мат. физ. – 2005. – №3. – P. 569-576.

[5] Fantoni R., Pastero G. Direct correlation function of the Widom – Rowlinson model // Physical A. – 2004. - V. 332. – P. 349-359.

[6] Li Huabing, Lu Xiaoyan, Fang Haiping, Qian Yuehong. Force evalutions in lattice Boltzmann simulations with moving boundaries in two dimensions // Phys Rev. E. – 2004. – №2.-P. 22-30. https://doi.org/10.1103/physreve.70.026701

[7] Shaikhova G. S., Shaikhova G. N. Traveling wave solutions for the two-dimensional. Zakharov-Kuznetsov-Burgers equation // Math series. Bulletin of the Karaganda University. - 2018.-Vol.92, №2 - P.94-98. https://doi.org/10.31489/2018m4/94-98

[8] Kazhikenova S.Sh., Ramazanov M.I., Khairkulova A.A., Shaikhova G.S. Àpproximation of the temperatures model of inhomogeneousmelts with allowance for energy dissipation. Math series. Bulletin of the Karaganda University. - 2018.-Vol.90, №2 - P.297-299. https://doi.org/10.31489/2018m2/93-100

[9] Issagulov A.Z., Belomestny D., Shaiкhova G.S., Zhurov V.V., Kassymova L.Zh.,. Zhetimekova G. Zh. "Ғunctions of atoms radial distribution and pair potential of some semiconductors melts // The Bulletin the National Academy Of Sciences of the he Republic of Kazakhstan. - 2019. Almaty. - Vol.4. P.6-13. https://doi.org/10.32014/2019.2518-1467.86

[10] Issagulov A. S., Kazhikenova S.Sh., Shaiкhova G.S., Mahmetova G.Sh., Kassymova L.G. Evaluation of pressure and volumetric modules in melted systems // Chemistry series. Bulletin of the Karaganda University. - 2018. Vol. 90, №2. -P.51-57.

[11] Volodin V. N., Tuleushev Y. Zh., Kenzhaliyev B. K., Trebukhov S. A. (2020). Thermal degradation of hard alloys of the niobiumcadmium system at low pressure. Kompleksnoe Ispolʹzovanie Mineralʹnogo syrʹâ/Complex Use of Mineral Resources/Mineraldik Shikisattardy Keshendi Paidalanu, 1(312), 41–47. https://doi.org/10.31643/2020/6445.05

[12] Kenzhaliyev, B. K., Surkova, T. Y., & Yessimova, D. M. (2019). Concentration of rare-earth elements by sorption from sulphate solutions. Kompleksnoe Ispolʹzovanie Mineralʹnogo syrʹâ/Complex Use of Mineral Resources/Mineraldik Shikisattardy Keshendi Paidalanu, 3(310), 5–9. https://doi.org/10.31643/2019/6445.22

[13] Kenzhaliev, B. K., Kul'deev, E. I., Luganov, V. A., Bondarenko, I. V., Motovilov, I. Y., & Temirova, S. S. (2019). Production of Very Fine, Spherical, Particles of Ferriferous Pigments from the Diatomaceous Raw Material of Kazakhstan. Glass and Ceramics, 76(5-6), 194–198. https://doi.org/10.1007/s10717-019-00163-w

[14] Адильбеков Н.А., Шайхова Г.С., Журов В.В., Шегебаева Г.Е. Численное решение одной системы интегральных уравнений фредгольма третьего рода в задаче об опорном давлении вблизи очистной выработки // Новости науки Казахстана. - 2019. - № 3, -С.98-103.

References

[1] Asthagiri D., Pratt Lawrence R., Kress J.D. Free energy of liquid water on the basis of quasichemical theory and ab initio molecular dynamics. *Phys. Rev*. – 2003. *4*, 64–68. (in Eng.). https://doi.org/10.1103/physreve.68.041505

[2] Alemany M.M.G., Jain Manish, KronikLeeor, Chelikowsky James R. Real-space pseudopotenital method for computing the electronic properties of periodic system. *Phys. Rev. B.* 2004. *7*, 64–70. (in Eng.). https://doi.org/10.1103/physrevb.69.075101

[3] Shaiкhova G.S., Mahmetova G.Sh., Kasymova L.G. On the dynamic properties of the molten state of a substance. *Work of the University*, Karaganda. 2018. *1*, 36-40. (in Kaz.).

[4] Vasilyev A.N. Metod diagonalizatsii parnykh korrelyatsionnykh funktsiy dlya mnogokomponentnoy zhidkoy sistemy. *Teor. i mat. fiz.* 2005. *3*, 569-576. (in Russ.).

[5] Fantoni R., Pastero G. Direct correlation function of the Widom – Rowlinson model. Physical A. 2004. *332*, 349-359 (in Eng.).

[6] Li Huabing, Lu Xiaoyan, Fang Haiping, Qian Yuehong. Force evalutions in lattice Boltzmann simulations with moving boundaries in two dimensions. *Phys Rev. E*. 2004. *2,* 22-30. (in Eng.). https://doi.org/10.1103/physreve.70.026701

[7] Shaikhova G. S., Shaikhova G. N. Traveling wave solutions for the two-dimensional. Zakharov-Kuznetsov-Burgers equation. *Math series. Bulletin of the Karaganda University*. 2018. *92*, *2,* 94-98. (in Eng.). https://doi.org/10.31489/2018m4/94-98

[8] Kazhikenova S. Sh., Ramazanov M.I., Khairkulova A.A., Shaikhova G.S.. Approximation of the temperatures model of inhomogeneousmelts with allowance for energy dissipation. Math series. *Bulletin of the Karaganda University*. 2018. *90*, *2*, 297-299 (in Eng.). https://doi.org/10.31489/2018m2/93-100

[9] Issagulov A.Z., Belomestny D., Shaiкhova G.S., Zhurov V.V., Kasymova L.Zh., Zhetimekova G. Zh. Functions of atoms radial distribution and pair potential of some semiconductors melts. *The Bulletin the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan*. 2019. Almaty.*4*, 6-13 (in Eng). https://doi.org/10.32014/2019.2518-1467.86

[10] Issagulov A. S., Kazhikenova S.Sh., Shaiкhova G.S., Mahmetova G.Sh., Kasymova L.G. Evaluation of pressure and volumetric modules in melted systems. *Chemistry series. Bulletin of the Karaganda University*. 2018. *90, 2,* 51-57 (in Eng.).

[11] Volodin V. N., Tuleushev Y. Zh., Kenzhaliyev B. K., Trebukhov S. A. (2020). Thermal degradation of hard alloys of the niobiumcadmium system at low pressure. Kompleksnoe Ispolʹzovanie Mineralʹnogo syrʹâ/Complex Use of Mineral Resources/Mineraldik Shikisattardy Keshendi Paidalanu, 1(312), 41–47. (in Eng.). https://doi.org/10.31643/2020/6445.05

[12] Kenzhaliyev, B. K., Surkova, T. Y., & Yessimova, D. M. (2019). Concentration of rare-earth elements by sorption from sulphate solutions. Kompleksnoe Ispolʹzovanie Mineralʹnogo syrʹâ/Complex Use of Mineral Resources/Mineraldik Shikisattardy Keshendi Paidalanu, 3(310), 5–9. (in Eng.). https://doi.org/10.31643/2019/6445.22

[13] Kenzhaliev, B. K., Kul'deev, E. I., Luganov, V. A., Bondarenko, I. V., Motovilov, I. Y., & Temirova, S. S. (2019). Production of Very Fine, Spherical, Particles of Ferriferous Pigments from the Diatomaceous Raw Material of Kazakhstan. Glass and Ceramics, 76(5-6), 194–198. (in Eng.). https://doi.org/10.1007/s10717-019-00163-w

[14] AdilbekovN.A, ShaikhovaG.S, ZhurovV.V, Shegebayeva G.E. Chislennoye resheniye odnoy sistemy integralnykh uravneniy fredgolma tretyego roda v zadache ob opornom davlenii vblizi ochistnoy vyrabotki. *Novosti nauki Kazakhstana.* 2019. *3*, 98-103 (in Russ.).