

гию системы с парным взаимодействием между частицами:

$$\begin{aligned} PV &= NkT - (6v^2)^{-1} \int \int |q_1 - q_2| \Phi(|q_1 - q_2|) \times \\ &\quad \times F_2(q_1, q_2) dq_1 dq_2, \\ E &= 3NkT/2 - (2v^2)^{-1} \int \int \Phi(|q_1 - q_2|) \times \\ &\quad \times F_2(q_1, q_2) dq_1 dq_2, \end{aligned}$$

где $v = V/N$ — уд. объём.

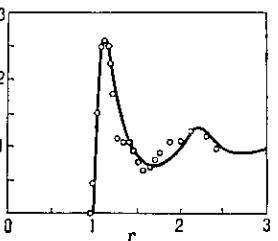
Зависимость радиальной ф-ции распределения от расстояния можно определить экспериментально по угл. зависимости когерентного рассеяния рентг. лучей. Интенсивность $I(s)$ рентг. лучей с длиной волны λ , рассеянных под углом θ к первичному пучку интенсивности I_0 , определяется выражением

$$\frac{I(s)}{I_0} = 1 + \frac{4\pi}{v} \int_0^\infty [F_2(r) - 1] \frac{\sin(rs)}{s} r dr,$$

где $s = (4\pi/\lambda) \sin(\theta/2)$.

Обращая это соотношение, можно найти зависимость F_2 от расстояния r . При достаточно малых r (порядка неск. газокинетич. радиусов молекул) $F_2(r)$ может

Радиальная функция распределения. Сплошная линия — теоретическая кривая (r — в единицах радиуса молекул), точки соответствуют экспериментальным данным для Ag при $T = 91,8 \text{ K}$ и $P = 1,8 \cdot 10^6 \text{ Па}$.



иметь ряд максимумов, соответствующих ближнему порядку, а затем она стремится к 1 (рис.).

Ф-ции распределения F_1, \dots, F_s удовлетворяют цепочке ур-ий (см. Богоявленова уравнения), к-рые можно решить с граничным условием ослабления корреляции молекул при увеличении расстояния между ними:

$$F_s(q_1, \dots, q_s) - \prod_{1 \leq i \leq s} F_i(q_i) \rightarrow 0$$

при $|q_i - q_j| \rightarrow \infty$. Для пространственно однородных систем $F_1(q) = 0$. При решении цепочки ур-ий для F_s в виде разложения по степеням плотности v^{-1} получим *виртуальные разложения* для ур-ия состояния и К. ф., а в случае кулоновского взаимодействия между частицами при решении цепочки ур-ий в виде разложения по степеням плазменного параметра v/r_d^3 , где r_d — дебаевский радиус экранирования, получим результаты теории электролитов Дебая — Хюккеля.

В квантовой статистич. механике К. ф. определяют при помощи статистического оператора (матрицы плотности) всей системы $\rho(q_1, \dots, q_N; q'_1, \dots, q'_N)$ как статистич. операторы комплексов из s молекул:

$$\begin{aligned} F_s(q_1, \dots, q_s; q'_1, \dots, q'_s) &= \\ &= V^s \text{Sp } \rho(q_1, \dots, q_N; q'_1, \dots, q'_N), \end{aligned}$$

где операция Sp взятия следа выполняется по переменным $s+1, \dots, N$ частиц. Ф-ции $F_s(q_1, \dots, q_s; q'_1, \dots, q'_s)$ симметричны или антисимметричны относительно перестановок q или q' в зависимости от того, какой статистике подчиняются частицы (симметричны в случае Бозе — Эйнштейна статистики и антисимметричны в случае Ферми — Дирака статистики). Диагональные элементы квантовой К. ф. имеют смысл плотности распределения комплекса из s частиц. Смысл недиагональных элементов становится ясен, если перейти к Вигнера функции распределения, к-рая зависит от q и импульсов p всех частиц $\rho(q, p)$ и явля-

ется фурье-образом статистич. оператора $\rho(q-\xi/2, q+\xi/2)$ по переменным ξ , что соответствует преобразованию Вейля. В результате получаются квантовые s -частичные операторы $F_s(q_1, \dots, q_s; p_1, \dots, p_s)$, которые являются квазивероятностями, т. е. их интегрирование по импульсам даёт распределение по координатам, а интегрирование по координатам — распределение по импульсам, однако они не имеют смысла обычных вероятностей, т. к. могут быть отрицательными.

Квантовые s -частичные К. ф. можно выразить через волновые ф-ции в представлении вторичного квантования $\psi(q), \psi^+(q')$:

$$\begin{aligned} F_s(q_1, \dots, q_s; q'_1, \dots, q'_s) &= \\ &= v^s \langle \psi^+(q_1) \dots \psi^+(q_s) \psi(q'_1) \dots \psi(q'_s) \rangle, \end{aligned}$$

где $\langle \dots \rangle$ означает усреднение с полным статистич. оператором, а $\psi(q), \psi^+(q')$ удовлетворяют перестановочным соотношениям статистики Ферми — Дирака или статистики Бозе — Эйнштейна. Через квантовые одно- и двухчастичные операторы можно вычислить сп. значения давления и энергии. В отличие от классич. случая, для этого нужно знать не только диагональные элементы F_2 , но и недиагональные элементы $F_1(q, q')$, т. к. плотность кинетич. энергии определяется величиной $(\hbar^2/2m) \nabla_q^2 F_1(q, q') \Big|_{q=q'}$.

В статистич. механике квантовых и классич. систем используют также пространственно-временные К. ф., к-рые определяют как статистич. средние от произведения операторов (или динамич. переменных), взятых для разл. моментов времени и точек пространства. Напр., в квантовом случае используют К. ф.

$$\langle \psi^+(x, t) \psi(x', t') \rangle$$

$$\langle \psi^+(x_1, t_1) \psi(x_1, t_1) \psi^+(x_2, t_2) \psi(x_2, t_2) \rangle.$$

Пространственно-временные К. ф. применяют в теории неравновесных процессов, т. к. через них выражается реакция системы на внеш. возмущения и, следовательно, восприимчивости (см. Грина функция). При помощи пространственно-временных К. ф. потоков энергии, импульса или числа частиц можно вычислить кинетич. коэффициенты (см. Грина — Кубо формула). Пространственно-временные К. ф. позволяют выразить когерентные и некогерентные составляющие дифференциального эф. сечения рассеяния нейтронов в среде, что является важным методом эксперим. исследования К. ф.

Лит.: Физика простых жидкостей, пер. с англ., [ч. 2], М., 1973, гл. 2; Исаиахар А., Статистическая физика, пер. с англ., М., 1973; Балеску Р., Неравновесная и неравновесная статистическая механика, пер. с англ., т. 1, М., 1978, гл. 8; Богоявленов Н. Н., Избр. труды по статистической физике, М., 1979; Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П., Физическая кинетика, М., 1979; Климонтович Ю. Л., Статистическая физика, М., 1982. Д. Н. Зубарев.

КОРРЕЛЯЦИОННАЯ ФУНКЦИЯ случайного процесса $\{X(t), t \in T\}$ — ф-ция $B(s, t) = M[X(s) - MX(s)][X(t) - MX(t)]^*$, $s, t \in T$, [здесь $MX(t)$ — первый момент процесса, $*$ означает комплексное сопряжение; предполагается, что $M |X(t)|^2 < \infty$]. В случае векторного процесса $\{X_i(t)\}_{i=1}^m$ К. ф. наз. корреляционная матрица $B(s, t) = ||B_{ij}(s, t)||_{i,j=1}^m$, где $B_{ij}(s, t) = M[X_i(s) - MX_i(s)][X_j(t) - MX_j(t)]^*$ — взаимная К. ф. процессов X_i и X_j , B_{ii} наз. иногда аутокорреляционной ф-ункцией. Характеристич. свойство К. ф. — её положит. определённость: для любых $t_1, \dots, t_n \in T$ и комплексных c_1, \dots, c_m : $\sum_{i,j=1}^m c_i c_j^* B(t_i, t_j) \geq 0$. Для процесса с независимыми значениями $B(s, t) = 0$ при $s \neq t$. Для стационарных в широком смысле процессов К. ф. зависит лишь от разности $t-s$: $B(s, t) = R(t-s)$. Если при этом процесс непрерывен в среднем квадратическом, т. е. $M |X(t) - X(s)|^2 \rightarrow 0$ при $t \rightarrow s$, то К. ф.