



ИТОГИ НАУКИ И ТЕХНИКИ.
Современная математика и ее приложения.
Тематические обзоры.
Том 213 (2022). С. 3–9
DOI: 10.36535/0233-6723-2022-213-3-9

УДК 532.782

СИНГЛЕТНОЕ ЛИНЕЙНОЕ УРАВНЕНИЕ ДЛЯ ОДНОЧАСТИЧНОЙ ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ В СТАТИСТИЧЕСКОЙ ФИЗИКЕ ПОВЕРХНОСТНЫХ ЯВЛЕНИЙ В ЖИДКОСТЯХ

© 2022 г. Ю. В. АГРАФОНОВ, И. С. ПЕТРУШИН, Д. В. ХАЛАИМОВ

Аннотация. Предложен алгоритм решения линейного интегрального уравнения Фредгольма второго рода для одночастичной функции распределения молекулярной системы твердых сфер вблизи твердой поверхности. Ядро и правая часть уравнения вычисляются на основе аналитической аппроксимации Перкуса—Йевики, заданной на ограниченном интервале для пространственно-однородной макроскопической жидкости. Решение для одночастичной функции ищется в классе кусочно-непрерывных функций. Сформулирован метод аналитического вычисления на каждом интервале в области определения функции.

Ключевые слова: жидкость твердых сфер, частичные функции распределения, уравнения Орнштейна—Цернике, интегральное уравнение Фредгольма второго рода, граничные слои жидкостей.

SINGLET LINEAR EQUATION FOR ONE-PARTICLE DISTRIBUTION FUNCTION IN STATISTICAL PHYSICS OF SURFACE PHENOMENA IN LIQUIDS

© 2022 Yu. V. AGRAFONOV, I. S. PETRUSHIN, D. V. KHALAIMOV

ABSTRACT. In this work we suggest the algorithm to solve the linear Fredholm integral equation of the second kind for the one-particle distribution function of simple liquid near the hard surface. The core and the right part of the equation are guessed using Percus-Yevick approximation defined on finite interval for spatial macroscopic liquid. We suggest an approach to solve the equation analytically for each interval where function is defined.

Keywords and phrases: supercooled liquid, ideal glass, partial distribution function, replicas, chaotic phase transition of the first kind, Fredholm equation of the second kind.

AMS Subject Classification: 45B05, 45G15

1. Введение. В классической статистической физике систем сильно взаимодействующих частиц математический аппарат частичных функций распределения является одним из основных способов реализации канонического распределения Гиббса, которое в общем виде определяет вероятностное распределение молекул в пространстве (микроструктура вещества), а также все макроскопические характеристики, однозначно вытекающие из него.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 18-02-00523а). Авторы признательны А. А. Гаврилюку за проявленный к работе интерес.

Отметим, что метод функций распределения сводит задачу к рассмотрению функций от небольшого числа переменных и соответственно открывает новые возможности выявления локальных характеристик, изначально скрытых в полном распределении Гиббса для большой системы взаимодействующих частиц (при $N \approx 10^{23}$).

Перечислим некоторые из современных проблем. До недавнего времени остается до конца нерешенной задача описания метастабильных состояний в системе твердых сфер, несмотря на достигнутый прогресс в этой области в работах [6, 8–14], отмеченных Нобелевской премией по физике за 2021 г. Более того, непонятно как описывать термодинамически-равновесные системы. В частности, в системе твердых сфер существует возможность перейти в кристаллическую структуру с разной сингонией: либо в гранецентрированную кубическую, либо в гексагональную. В этих структурах первые координационные числа полностью совпадают; тонкие различия проявляются лишь в дальних координационных сферах. Открыты для изучения такие проблемы, как поведение жидких систем вблизи твердой поверхности, поведение в ограниченных объемах, структура дальних корреляций, структура жидкости в переходной области и т. д. Одной из принципиальных задач теории жидкостей является исследование особенностей ближнего порядка и формулировка уравнений, наиболее точно описывающих эти особенности.

Основной тренд решения всех перечисленных проблем — это применение метода частичных функций распределения. Важнейшими из этих функций являются одночастичная $G_1(\vec{r}_1)$ и двухчастичная $G_{12}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ функции распределения. Обе эти функции находятся совместным решением системы нелинейных интегральных уравнений Орнштейна—Цернике (ОЦ) [8, 15, 17]

$$\begin{aligned}\omega_1 &= n \int G_2 C_{12}^1 d(2) + \mu, \\ h_{12} &= C_{12}^{(2)} + n \int G_3 C_{13}^{(2)} h_{23} d(3).\end{aligned}\tag{1}$$

Здесь $d(i) \equiv dr_i$ означает интегрирование по координатам i -й частицы; n — плотность жидкости; $G_i = \exp\{-\Phi_i/kT + \omega_i\}$ — одночастичная функция распределения, описывающая положение частицы в лабораторной системе координат; Φ_i — потенциальная энергия частицы во внешнем поле; ω_i — одночастичный термический потенциал, учитывающий взаимодействие частицы с окружающей средой; химический потенциал μ находится из условия перехода к пространственно-однородной системе; парная корреляционная функция $h_{ij} = \exp\{-\Phi_{ij}/kT + \omega_{ij}\}$ связана с двухчастичной функцией распределения соотношением $G_{ij} = G_i G_j (1 + h_{ij})$; ω_{ij} — двухчастичный термический потенциал, учитывающий коллективное взаимодействие двух частиц через их окружение; $C_{ij}(k)$ — прямые корреляционные функции:

$$\begin{aligned}C_{ij}^{(1)} &= h_{ij} - \omega_{ij} - 1/2 h_{ij}(\omega_{ij} + M_{ij}^{(1)}), \\ C_{ij}^{(2)} &= h_{ij} - \omega_{ij} - M_{ij}^{(2)},\end{aligned}\tag{2}$$

где $M_{ij}^{(1)}, M_{ij}^{(2)}$ — бесконечные функциональные ряды от искомым функций распределения.

При решении конкретных задач эти ряды $M_{ij}^{(1)}, M_{ij}^{(2)}$ аппроксимируют простыми аналитическими выражениями, что приводит к нелинейным интегральным уравнениям. Наиболее известными из них являются гиперцепное, Перкуса—Йефика, Мартынова—Саркисова, Роджера—Янга. Однако методическая погрешность данных аппроксимаций неизвестна. Как правило, уравнения решаются численно, а полученное решение сравнивается с данными численного эксперимента, являющегося эталоном точности. Отметим, что для отталкивающих потенциалов, в особенности для потенциала твердых сфер, приближение Перкуса—Йефика лучше, чем гиперцепное. Однако при низких температурах и умеренной плотности для более реалистичных парных потенциалов, имеющих притягивающую часть, уравнение ГПЦ дает лучшие результаты, чем уравнение ПЙ. Однако оба замыкания являются термодинамически несогласованными: характеристики, вычисленные по уравнению состояния и сжимаемости дают ошибку 10% и более. Роджер и Янг предложили обеспечивать термодинамическую согласованность посредством введения подгоночных параметров. В частности, в их замыкании подгоночный параметр подбирается так, чтобы на малых расстояниях между частицами реализовывалось приближение Перкуса—Йефика, а на больших расстояниях — гиперцепное приближение. Термодинамическое согласование осуществляется

по вириальному уравнению и уравнению сжимаемости. Замыкание Роджера—Янга оказалось весьма удачным для чисто отталкивательных потенциалов (мягкие сферы). В других случаях оно менее удовлетворительно. Однако наилучшим термодинамически согласованным является замыкание Мартынова—Саркисова: его ошибка для системы твердых сфер не превышает 2%.

Подчеркнем, что приближение Перкуса—Йефика является единственным, которое допускает аналитическое решение для пространственно-однородных трехмерных молекулярных систем [15]. В последние годы разрабатываются аналитические методы решения для одномерных и двумерных молекулярных систем [18]. Отметим также интенсивно развивающееся направление по аморфизации макроскопических растворов, упоминавшееся выше [6, 8–14].

В методе частичных функций распределения термодинамически-равновесных систем макроскопическое тело рассматривается как бесконечно большое число одинаковым образом устроенных подсистем (копий). В каждой из копий межмолекулярное взаимодействие задается одинаковым образом, что обеспечивает однородность тела на микроскопическом уровне. Статистическое распределение каждой подсистемы по различным состояниям описывается гиббсовской экспонентой. Это является следствием эргодической гипотезы, согласно которой средние значения макроскопических величин равны их средним значениям по ансамблю Гиббса. С помощью распределения Гиббса может быть вычислено среднее значение любой физической величины либо непосредственно с помощью статистического интеграла, либо с помощью частичных функций между одновременными положениями нескольких частиц в заданных точках пространства. Для метастабильных состояний эргодическая гипотеза не выполняется. Хаотическое расположение частиц в фиксированных точках пространства приводит к локальной микроскопической неоднородности.

Модернизация заключается в том, что рассматриваются одинаковые копии подсистем (реплики). Внутри каждой из них, как и в термодинамически-равновесных системах, межмолекулярное взаимодействие задается одинаковым образом. Однако между репликами теперь существует взаимодействие. Параметры взаимодействия подбираются так, чтобы среднее расстояние между частицами было меньше, чем в жидкости. По существу, это является критерием отличия переохлажденной жидкости от идеального стекла. В результате удастся описать переход из начального равновесного состояния в конечное метастабильно состояние, не прибегая к рассмотрению промежуточных кинетических процессов. В англоязычной литературе теория реплик «хаотического фазового перехода первого порядка» и его реализация для практически важных молекулярных систем (многокомпонентные жидкости с различными потенциалами межмолекулярного взаимодействия, гелеобразные системы и т. д.) получили бурное развитие. Теория реплик по значимости стоит в одном ряду с формулировкой канонического распределения Гиббса и метода интегральных уравнений статистической теории термодинамически равновесных жидкостей. Однако важно подчеркнуть, что теория реплик не дает никакого представления о релаксационных процессах. Интегральные уравнения для частичных функций распределения дают только представление о структурных характеристиках термодинамически равновесных и метастабильных состояний, достигаемых на бесконечно больших временных интервалах.

Для пространственно-однородных жидкостей двухчастичная функция распределения зависит от расстояния между частицами $r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$. В этом случае уравнение для одночастичной функции распределения удовлетворяется тождественно. Система двух уравнений ОЦ сворачивается к одному уравнению для двухчастичной функции распределения $G_{12}^{(0)}(r_{12})$. Для пространственно-неоднородных систем функции необходимо решать оба уравнения ОЦ для функций $G_1(\vec{r}_1)$ и $G_{12}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$. Заметим, что решение уравнений (1) и (2) для этих функций многих переменных является сложной вычислительной задачей. Эту проблему обходят заменой прямой корреляционной функции $C_{12}^{(0)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ ее граничным значением $C_{12}^{(0)}(r_{12})$. В зависимости от применяемой аппроксимации получают то или иное нелинейное интегральное уравнение на одночастичную функцию распределения (синглетное приближение), описывающую профиль локальной плотности $n(z_1) = nG_1(z_1) = n \exp\{\omega_1(z_1)\}$ вблизи твердой поверхности. Все они являются нелинейными интегральными уравнениями и решаются численно. Тем не менее, методическая погрешность синглетного приближения также остается неизвестной, и полученное решение вновь приходится сравнивать с численным экспериментом. Анализ численных решений приведен в работе [7]. Таким

образом, описание структуры жидкостей в контакте с твердой поверхностью остается актуальной задачей.

В наших работах [2, 3, 16] было предложено переопределить неприводимые функциональные диаграммы в одночастичном уравнении так, чтобы нелинейности компенсировались, и в синглетном приближении получилось линейное интегральное уравнение в классификации Фредгольма второго рода. Проведен анализ литературы по аналитическому и численному решению уравнений Фредгольма второго рода с целью реализации алгоритма, требующего наименьших вычислительных ресурсов.

2. Линейное интегральное уравнение физики жидкостей на границе с твердой поверхностью. Для вычисления локальной микроструктуры граничных слоев жидкостей и термодинамических параметров необходимо знать одночастичную функцию распределения $G_1(\vec{r}_1) = \exp\{-\Phi_1(\vec{r}_1)/kT + \omega_1(\vec{r}_1)\}$, которая определяет вероятность нахождения частицы во внешнем поле $\Phi_1(\vec{r}_1)$ вблизи точки с координатами $\vec{r}_1$. Одночастичный термический потенциал $\omega_1(\vec{r}_1)$ учитывает взаимодействие частицы с окружающей средой. Линейное интегральное уравнение Фредгольма для функции распределения $\exp\{\omega_1(z_1)\}$ для жидкости вблизи твердой поверхности ($\Phi_1(\vec{r}_1) = 0$) было получено в [2, 3, 16]:

$$(e^{\omega_1(z_1)} - 1) - 2\pi n \int_0^\infty dz_2 (e^{\omega_1(z_2)} - 1) \int_{|z_{12}|}^\infty r_{12} dr_{12} C_{12}(r_{12}) = -2\pi n \int_{z_1}^\infty dz_{12} \int_{z_{12}}^\infty r_{12} dr_{12} C_{12}(r_{12}). \quad (3)$$

Здесь учтено, что взаимодействие частиц жидкости с поверхностью осуществляется как взаимодействие твердых сфер. Прямая корреляционная функция $C_{12}(r_{12})$ должна быть предварительно вычислена. Учтем, что (3) есть уравнение Фредгольма второго рода. Ядро уравнения и правая часть предварительно вычисляются из соответствующего интегрального уравнения для двухчастичной функции распределения макроскопической жидкости [8, 15, 17]. В том случае, когда параметры уравнения вычисляются аналитически, данное уравнение также может быть решено аналитически. В частности, для замыкания Перкуса—Йевики [8] внутренние интегралы уравнения (3) можно представить в виде

$$K(|z|) = -\theta(1 - |z|)\Psi(|z|),$$

$$\Psi(|z|) = \int_{|z|}^1 r_{12} dr_{12} (\alpha + \beta r_{12} + \gamma r_{12}^3), \quad (4)$$

где $\alpha = (2\eta + 1)^2/(\eta - 1)^4$, $\beta = -3\eta(2 + \eta)^2/2(\eta - 1)^4$, $\gamma = \eta(2\eta + 1)^2/2(\eta - 1)^4$.

Непосредственное вычисление показывает, что

$$\Psi(z) = \Psi(0) + \frac{\Psi^{(2)}(0)}{2!} z^2 + \frac{\Psi^{(3)}(0)}{3!} z^2 + \frac{\Psi^{(5)}(0)}{5!} z^2, \quad (5)$$

$$\Psi(0) = \frac{a}{2} + \frac{b}{3} + \frac{c}{5}, \quad \Psi^{(2)}(0) = -a, \quad \Psi^{(3)}(0) = -2b, \quad \Psi^{(5)}(0) = -24c. \quad (6)$$

Соответственно, можно найти значение производной $\Psi^{(i)}(z)$ ($i = 0, \dots, 5$) в точке $z = 1$. В результате уравнение (3) принимает вид

$$f(z_1) = -12\eta \int_0^{1+z_1} dz_2 f(z_2) \Psi(|z_1 - z_2|) + 12\eta \int_{z_1}^1 dz_2 \Psi(z_2), \quad (7)$$

$$f(z_1) = -12\eta \int_{z_1-1}^{z_1+1} dz_2 f(z_2) \Psi(|z_1 - z_2|), \quad (8)$$

где $\eta = \pi n/6$ и $f(z_1) = \exp(\omega_1(z_1)) - 1$.

Асимптотическое поведение функции $f(z_1)$ при больших значениях аргумента вычислено в наших работах [1, 4]. Было показано, что решение имеет осциллирующий, затухающий вид, однако

амплитуда колебаний оставалась неизвестной, так как для ее определения необходимо знать решение на малых расстояниях. Тем не менее, было показано, что волновые числа, определяющие скорость затухания и период осцилляций, находятся численным решением двух трансцендентных уравнений. Численное решение системы трансцендентных уравнений проводилось методом последовательных приближений для плотностей жидкости в диапазоне от 0,26 до 0,785. Было показано, что при малой плотности молекулярной системы затухание носит короткодействующий характер. Однако с ростом плотности осцилляции носят дальнодействующий характер, что обусловлено эффектами плотной упаковки твердых сфер. Полученное решение можно распространить на молекулярные системы с реалистичными потенциалами межчастичного взаимодействия. В данной работе мы рассмотрим решение системы уравнений (7), (8) при малых значениях аргумента.

Из уравнения (7) следует, что интегрирование искомой функции нужно вести на интервале $1 \leq z \leq 2$. Но для этого, как следует из (6), необходимо знать ее поведение на интервале $2 \leq z \leq 3$ и т. д. Таким образом, получается бесконечная последовательность функций $f_n(z_1)$, $n \leq z_1 \leq n+1$ ($n = 0, 1, 2, 3, \dots$). Решение уравнений (7), (8) будем искать в классе кусочно-непрерывных функций. Поскольку второе слагаемое в (7) есть полином шестой степени, то полагаем

$$f(z) = \sum_{n=0}^6 \frac{f^{(n)}(0)}{n!} z^n, \quad f(1) = \sum_{n=0}^6 \frac{f^{(n)}(0)}{n!}, \quad 0 \leq z \leq 1. \quad (9)$$

Соответственно можно найти все производные функции $f(z)$ в точке $z = 1$. Все они будут выражаться через производные $f^{(n)}(0)$. Точно также полагаем, что

$$f(z) = \sum_{n=0}^6 \frac{f^{(n)}(1)}{n!} (z-1)^n, \quad f(2) = \sum_{n=0}^6 \frac{f^{(n)}(1)}{n!}, \quad 1 \leq z \leq 2. \quad (10)$$

Из (10) можно найти все производные функции $f(z)$ в точке $z = 2$, которые будут выражаться через производные $f^{(n)}(1)$. Аналогично можно записать разложение функции $f(z)$ в ряд по степеням z на остальных интервалах. Таким образом последовательно вычисляется функция $f(z)$ на всем интервале $0 \leq z < \infty$.

Теперь рассмотрим уравнение (7), которое с учетом высказанных соображений, запишем в виде

$$f(z_1) = -12\eta \left[\int_0^1 dz_2 f(z_2) \Psi(|z_1 - z_2|) + \int_1^{1+z_1} dz_2 f(z_2) \Psi(z_2 - z_1) \right] + 12\eta \int_{z_1}^1 dz_2 \Psi(z_2). \quad (11)$$

Дифференцируя обе части уравнения (11) и полагая затем $z_1 = 0$, получим систему уравнений, в которую входят функция $f(z)$ и ее производные $f^{(n)}(z)$ в точках $z_1 = 0$ и $z_1 = 1$. Например,

$$f(0) = -12\eta \int_0^1 dz_2 f(z_2) \Psi(z_2) + 12\eta \int_0^1 dz_2 \Psi(z_2), \quad (12)$$

$$f^{(1)}(0) = 12\eta \left(\int_0^1 dz_2 f(z_2) \Psi^{(1)}(z_2) - \Psi(0) \right), \quad (13)$$

$$f^{(2)}(0) = -12\eta \left(\int_0^1 dz_2 f(z_2) \Psi^{(2)}(z_2) - f(1) \Psi^{(1)}(1) \right), \quad (14)$$

$$f^{(3)}(0) = 12\eta \left[\int_0^1 dz_2 f(z_2) \Psi^{(3)}(z_2) - f(1) \Psi^{(2)}(1) + f^{(1)}(1) \Psi^{(1)}(1) - \Psi^{(2)}(0) \right], \quad (15)$$

и т. д., вплоть до $f^{(6)}(z)$. В результате получается система линейных алгебраических уравнений шестого порядка, решение которой позволяет вычислить функцию $f(z)$ на интервалах $0 \leq z \leq 1$ и $1 \leq z \leq 2$.

Перейдем далее к решению уравнения (8). Значение функции $f(z_1)$ в левой части уравнения на интервале $1 \leq z \leq 2$, позволяет вычислить ее на следующем интервале $2 \leq z \leq 3$. С этой целью, выделив по отдельности интегрирование на разных интервалах, перепишем уравнение (8) в виде

$$\begin{aligned} \eta \int_2^{z_1+1} dz_2 f(z_2) \Psi(z_2 - z_1) = \\ = -\eta \left[\int_{z_1-1}^1 dz_2 f(z_2) \Psi(z_1 - z_2) + \int_1^{z_1} dz_2 f(z_2) \Psi(z_1 - z_2) + \int_{z_1}^2 dz_2 f(z_2) \Psi(z_2 - z_1) \right] - f(z_1). \end{aligned} \quad (16)$$

В правой части (14) все слагаемые вычисляются на интервале $0 \leq z \leq 2$ и являются заданными величинами. В результате получается интегральное уравнение Вольтерра первого рода, решение которого определяет функцию $f(z)$ на интервале $2 \leq z \leq 3$. Рассмотренный в уравнениях (12)–(16) алгоритм позволяет последовательно находить решение уравнения (6) на интервале $3 \leq z \leq 4$ и т. д. Подстановка полученного решения в (8) для $z > 4$ приводит к уравнениям Вольтерра для старших функций, которые также могут быть решены аналитически. Заметим, что для численного решения уравнения (3) с другими параметрами межмолекулярного взаимодействия и замыканиями необходимо предварительно их вычислить на основе решения нелинейных интегральных уравнений Орнштейна–Цернике.

3. Заключение. В настоящее время все нелинейные интегральные уравнения физики макроскопических жидкостей получаются суммированием приводимых диаграмм в формально точных уравнениях Орнштейна–Цернике. Неприводимые диаграммы попросту не учитываются, что приводит к приближенным уравнениям, методическая погрешность которых неизвестна. Оценка погрешности осуществляется сравнением с результатами численного эксперимента, который служит эталоном точности. Такая же ситуация наблюдается и при описании поверхностных явлений в жидкостях — так называемое синглетное приближение.

Разрабатываемый нами подход к статистической физике поверхностных явлений основан на предположении, что учет неприводимых диаграмм в бесконечных функциональных рядах для прямых корреляционных функций, можно проводить так, чтобы осуществлялась компенсация всех нелинейностей. Данный подход применен для модификации синглетного приближения одночастичной функции распределения жидкости в контакте с твердой поверхностью. В результате получается стандартное уравнение Фредгольма второго рода, ядро и правая часть которого находятся предварительно решением для прямой корреляционной функции одного из нелинейных интегральных уравнений макроскопической жидкости. В качестве такого мы выбрали уравнение Перкуса–Йевики, которое допускает аналитическое решение для прямой корреляционной функции. Соответственно решение уравнение Фредгольма второго рода также допускает аналитическое решение. Нами предложен алгоритм аналитического решения посредством разложения искомого решения в степенные ряды по малому параметру, характеризующему удаление частицы от твердой поверхности. Решение представлено полиномом шестой степени по этому параметру.

Для других прямых корреляционных функций ядро и правую часть уравнения Фредгольма второго рода необходимо предварительно определить численно. Соответственно уравнение также придется решать численно. Однако это требует меньших вычислительных затрат, чем решение нелинейного синглетного уравнения для одночастичной функции распределения. Заметим, что методическую погрешность предложенного нами уравнения все-таки придется сопоставлять с данными численного эксперимента. Такое сопоставление позволит выяснить, у какого уравнения методическая погрешность меньше.

Другим достоинством линейного уравнения является возможность обобщить его для описания тонких аморфных пленок на основе теории хаотического фазового перехода первого порядка. Заметим, что идеология этой теории до сих пор применялась для описания пространственно-однородных систем (в отсутствии внешних полей и вдали от ограничивающих поверхностей). Однако возможно применить теорию хаотического фазового перехода первого порядка для описания

структуры жидкости, граничащей с твердой поверхностью на основе уравнения (3). Предварительно ядро и правая часть уравнения (3) должны быть вычислены с помощью данной идеологии, а затем стандартными способами можно решать линейное интегральное уравнение. В результате появляется возможность описывать методами статистической физики поверхностную аморфизацию переохлажденных граничных слоев жидкостей.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Аграфонов Ю. В., Петрушин И. С. Расчет структурных характеристик аморфных тел методом молекулярных функций распределения// Изв. РАН. Сер. Физ. — 2020. — 84, № 7. — С. 951–956.
2. Agrafov Yu. V., Petrushin I. S. Two-particle distribution function of a non-ideal molecular system near a hard surface// Physics Procedia. — 2015. — 71. — P. 364–368.
3. Agrafov Yu. V., Petrushin I. S. Random first order transition from a supercooled liquid to an ideal glass// Cond. Matter Interphases. — 2020. — 22, № 2. — P. 291–302.
4. Agrafov Yu. V., Petrushin I. S. Linear singlet equation in the surface phenomena physics// J. Phys. Conf. Ser. — 2021. — 1847. — 012035.
5. Agrafov Yu. V., Petrushin I. S., Khalaimov D. V. Long-range oscillations of a single-particle distribution function for a molecular system of hard spheres near a solid surface in the Percus–Yevick approximation// J. Phys. Conf. Ser. — 2021. — 2036. — 012012.
6. Franz S., Mezard M., Parisi G., Peliti L. The response of glassy systems to random perturbations: A bridge between equilibrium and off-equilibrium// J Stat. Phys. — 1999. — 97, № 3-4. — P. 459–488.
7. He Y., Rice S. A., Xu X. Analytic solution of the Ornstein–Zernike relation for inhomogeneous liquids// J. Chem. Phys. — 2016. — 145. — 234508.
8. Martynov G. A. Fundamental Theory of Liquids. Method of Distribution Functions. — Bristol: Adam Hilger, 1992.
9. Mezard M., Parisi G. Thermodynamics of glasses: a first principles computation// J. Phys. Condens. Matter. — 1999. — 11, № 3-4. — P. A157–A165.
10. Parisi G., Procaccia I., Shor C., Zylberg J. Effective forces in thermal amorphous solids with generic interactions// Phys. Rev. E. — 2019. — 99, № 1. — 011001.
11. Parisi G., Slanina F. Toy model for the meanfield theory of hard-sphere liquids// Phys. Rev. E. — 2000. — 62, № 5. — 6554.
12. Parisi G., Zamponi F. The ideal glass transition of hard spheres// J. Chem. Phys. — 2005. — 123, № 14. — 144501.
13. Parisi G., Zamponi F. Amorphous packings of hard spheres for large space dimension// J. Stat. Mech. Theory Exp. — 2006. — 2006, № 3. — P03017.
14. Robles M., Lopez de Haro M., Santos A., Bravo Yuste S. Is there a glass transition for dense hard-sphere systems?// J. Chem. Phys. — 1998. — 108, № 3. — P. 1290–1291.
15. Rogers F. J., Young D. A. New, thermodynamically consistent, integral equation for simple fluids// Phys. Rev. A. — 1984. — 30, № 2. — 999.
16. Tikhonov D. A., Kiselyov O. E., Martynov G. A., Sarkisov G. N. Singlet integral equation in the statistical theory of surface phenomena in liquids// J. Mol. Liquids. — 1999. — 82. — P. 3–17.
17. Vompe A. G., Martynov G. A. The self-consistent statistical theory of condensation// J. Chem. Phys. — 1997. — 106, № 14. — P. 6095–6101.
18. Wertheim M. S. Exact solution of the Percus–Yevick integral equation for hard spheres// Phys. Rev. Lett. — 1963. — 10, № 8. — P. 321–323.

Аграфонов Юрий Васильевич
Иркутский государственный университет
E-mail: agrafonov@physdep.isu.ru

Петрушин Иван Сергеевич
Иркутский государственный университет
E-mail: ivan.kiel@gmail.com

Халаимов Даниил Вячеславович
Иркутский государственный университет
E-mail: thv.mail.ru@yandex.ru