

лектрические свойства различных сред. В структуре филиала имеются лаборатории волновой динамики многофазных систем, гидродинамики многофазных сред и нефтегазовой механики. Базовой кафедрой является кафедра механики многофазных систем Тюменского госуниверситета. Исследования ученых ТФ ИТПМ СО РАН, значительную часть которых составляют выпускники физического факультета, поддерживаются международными, российскими и региональными грантами. ТФ ИТПМ СО РАН имеет широкие связи с университетами, академическими и отраслевыми институтами США, Японии, Франции, Германии, Польши, Китая, Южной Кореи, Швеции, Израиля и др.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Шабаров А. Б. Региональные проблемы теплофизики, теплотехники, гидродинамики // Теплофизика, гидродинамика, теплотехника: Сб. статей, Вып. 2. Тюмень: Изд-во ТюмГУ, 2004. С. 3-9.
2. Шабаров А. Б., Шеломенцев В. В. Вузовская наука на рубеже тысячелетий// Тюмень, Вестник ТюмГУ. 2000. № 2. С. 30-38.

*Эдуард Абрамович АРИНШТЕЙН —
профессор кафедры моделирования
физических процессов и систем,
доктор физико-математических наук,
профессор*

УДК 536.7

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА В ТЮМЕНСКОМ УНИВЕРСИТЕТЕ.

Нет ничего практичнее хорошей теории.

АННОТАЦИЯ. Дано краткое резюме современного состояния статистической теории конденсированного состояния и представлены результаты, полученные в этой области исследований тюменской школой теоретической физики.

The author offers a brief summary of the present condition of the statistical theory of the condensed state and submits the results received in this area of researches by the tyumen school of theoretical physics.

Год 2005-й – юбилейный. Решением ООН этот год объявлен Международным годом физики в честь столетия возникновения современной физики, физики XX века. Нет необходимости доказывать, что лицо современной цивилизации не в последнюю очередь определяется достижениями современной физики. Радио и телевидение, микроэлектроника и современная вычислительная техника, ядерная энергетика, лазерная техника, молекулярная биология и современная физическая химия — это далеко не полный перечень тех областей науки и техники, которые базируются на фундаменте современной физики. И начало всему этому было заложено в 1905 г. в трех статьях Альберта Эйнштейна, носивших чисто теоретический характер и не обещавших, на первый взгляд, никаких практических приложений.

И в этом же 2005 г. Тюменская научная общественность также отмечает замечательный юбилей — 75 лет назад был открыт первый вуз Тюмени, из которого и вырос после ряда преобразований Тюменский государственный университет.

Совпадение этих двух юбилеев знаменательно. Для развития тюменского региона нужны были наука и высшее образование современного уровня, и именно это

послужило причиной преобразования Тюменского пединститута в университет. В настоящей статье будет представлена только одна из многих сторон этого преобразования — возникновение тюменской школы теоретической физики.

Преподавание теоретической физики в Тюменском пединституте осуществляли выпускники аспирантуры Уральского университета, их научная деятельность являлась продолжением их работы в аспирантуре УрГУ, ее интенсивность определялась возможностью поддерживать прежние научные связи, создать самостоятельное научное направление им не удалось.

Пополнение научного коллектива Тюменского университета в период его организации было довольно разнообразным. Среди новых сотрудников была и группа физиков-теоретиков из Томска, имевшая собственную научную тематику. Формально «актив» группы исчислялся в то время одной докторской диссертацией руководителя и пятью кандидатскими диссертациями. Впрочем, кандидаты наук прибыли в Тюмень в «урезанном» составе — только двое. К настоящему времени этот список пополнился шестнадцатью кандидатскими диссертациями. Пять бывших выпускников аспирантуры этой группы защитили докторские диссертации по различным темам, являющимся не только продолжением «исходной», но также и по новым, самостоятельным направлениям.

Основное научное направление нашей группы — статистическая теория конденсированного состояния вещества. Серьезная трудность, которую приходится преодолевать при разработке этой теории, состоит в том, что взаимодействие всех пар в большом, практически бесконечном количестве атомов и молекул конденсированной системы нельзя считать малым даже условно. В случае кристалла эта трудность обходится, так как существование периодической кристаллической структуры, определяемой экспериментально, указывает на существование минимума потенциальной энергии системы, реализуемого этой структурой, причем колебания атомов вблизи положения равновесия являются малыми. Другими словами, структура кристалла вводится в теорию изначально. Однако в случае неупорядоченных систем, таких как жидкость или аморфная система, структуру близко расположенной группы атомов или молекул требуется найти в ходе решения задачи, так как именно эта структура, «ближний порядок» по принятой терминологии, определяет все термодинамические свойства системы.

Актуальность проблемы, решаемой нашей группой и входившей в течение ряда лет в координационный план АН СССР, определяет увеличение количества и возрастание сложности технологических процессов, использующих новые неупорядоченные вещества.

Уже в течение нескольких десятков лет статистическая теория неупорядоченного состояния развивается на основе идеи, заложенной еще в конце 40-х гг. XX в. теорией ББГКИ (Боголюбова, Борна, Грина, Кирквуда, Ивона). Суть идеи состоит в том, чтобы исследовать структуру не всей большой, в «термодинамическом пределе» бесконечной системы, а малой группы, выделенной из этой системы. Так как структура этой группы определяется воздействием всей остальной системы, то, с одной стороны, знание этой структуры позволяет вычислить все термодинамические свойства большой системы, но с другой стороны, для ее определения требуется решить сложнейшую задачу о взаимодействии группы и остальной среды.

Задача оказалась настолько сложной, что до сих пор еще не найдено ее окончательное решение даже для простейшей модельной системы. Для этой модели — системы, в которой действуют только парные силы, определяемые сферически симметричным потенциалом, для определения всех термодинамических свойств достаточно знать лишь парную структуру, бинарную (парную) функцию распределения (или корреляционную функцию). Уравнения ББГКИ определяют бинарную корреляцион-

ную функцию через тройную, в свою очередь тройную — через четверную и так далее до бесконечности, они являются бесконечной системой «зацепляющихся» уравнений. Для расцепления этой системы были предложены различные схемы, но все они вносили неконтролируемые погрешности, приводящие к термодинамической несогласованности теории. Суть этого порока теории состоит в том, что выражения для различных термодинамических величин, содержащих бинарную функцию, при использовании решения полученных приближенных уравнений не удовлетворяют тождествам, которые обязательно должны выполняться при использовании «правильной» бинарной функции.

Был предложен альтернативный подход, состоящий в том, что для определения бинарной функции строились уравнения, основанные на некоторых соображениях, имеющих в основном качественный характер. Эти уравнения также оказались термодинамически несогласованными. Состояние теории на конец 1970-х гг. достаточно полно отражено в переводных монографиях [1,2]. В последнее время были предприняты неудачные попытки внести «руками» в эти уравнения поправки, устраняющие несогласованность теории, но в целом положение не изменилось. Так, в обзоре [3] прямо сказано: «Отметим, что многочисленные работы на эту тему не дают пока ясной картины и во многом противоречат друг другу».

Подход, развиваемый нашей группой, представляется более перспективным. Его основой является вариационный принцип, согласно которому в состоянии термодинамического равновесия термодинамический потенциал принимает минимальное значение. Этот принцип является обобщением вариационного принципа классической термодинамики и имеет ясный физический смысл. Проблема состоит в том, чтобы найти явное выражение термодинамического потенциала через корреляционные функции и доказать, что уравнения БГКИ эквивалентны вариационной задаче для этого выражения. В пионерской работе этого направления (Э. А. Аринштейн, 1957 г.) эта проблема была решена для унарной функции распределения, в конце 60-начале 70-х гг. удалось построить термодинамический потенциал в зависимости от двух функций распределения, унарной и бинарной.

В течение ряда лет кафедра теоретической физики Тюменского госуниверситета основное внимание уделяла задачам реализации найденного вариационного принципа для решения конкретных модельных задач и проверке условий применимости метода. Дело в том, что уравнение Боголюбова, из которого следуют уравнения для всех корреляционных функций, является функциональным уравнением для вспомогательной конструкции — производящего функционала этих корреляций. Выражение для термодинамического потенциала вариационной задачи удастся получить только в виде довольно сложнопостроенного ряда. Вычисление членов этого ряда невозможно произвести в общем виде, вычисление даже первых двух, максимум трех членов ряда даже в случае простейшей модели потребовало использования довольно изощренных методов и больших вычислительных ресурсов. При этом проблемы условий применимости метода, сходимости полученных рядов и точного смысла их предела приобретают существенное значение.

Тем не менее указанные трудности не могут заслонить существенных преимуществ вариационного подхода. Во-первых, любое приближение этого подхода автоматически является термодинамически согласованным, свободным от основного порока других методов, и дает — в этом приближении — сразу же всю термодинамическую информацию о системе. Во-вторых, вариационный принцип позволяет использовать прямые вычислительные методы, являющиеся наиболее эффективным инструментом решения широкого класса сложных уравнений. В-третьих, метод позволяет повысить точность полученного приближения путем оценки следующих членов ряда, в отличие от других подходов, где проблема повышения точности уравне-

ний не имеет столь очевидного решения. Заметим, что простейшее приближение вариационного метода эквивалентно одному из широко используемых приближений, так называемому гиперцепному (HNC) приближению.

В рамках общей проблемы разработки статистической теории конденсированного состояния были рассмотрены и некоторые частные вопросы. Отметим некоторые из них.

Доказана эквивалентность метода производящего функционала и метода случайных Гиббсовских полей, развиваемого группой ведущих московских математиков, применением которого был решен ряд принципиальных проблем статистической физики.

Разработан метод исследования уравнения Боголюбова путем перехода к новому — сопряженному уравнению.

Доказано отсутствие фазовых переходов в конечной системе, или практически — в системе достаточно малых размеров.

Разработан метод определения усредненных показателей Ляпунова, что дает скорость молекулярного перемешивания.

Найдена область применимости и проанализированы некоторые свойства решения модельного уравнения самосогласованного поля — уравнения Власова.

Найден метод расчета свободной энергии поверхности жидкости путем ее разложения по структурным функциям объемных фаз.

Построена теория дефектного кристалла, определено влияние дефектности на его устойчивость и термодинамические свойства.

Построена система функций, разложение по которым дает возможность эффективно вычислять поправки к приближенному выражению для термодинамического потенциала.

Построен вариационный принцип для термодинамического потенциала квантовой системы, выраженного через ее матрицу плотности (распределение вероятностей состояний частиц).

Раскрыт механизм возникновения дальних критических корреляций и связи между критическими показателями.

Заметим, что каждую из этих задач можно рассматривать как самостоятельную научную проблему.

Кроме того, на кафедре теоретической физики был решен ряд задач прикладного характера для тюменских отраслевых НИИ.

В заключение можно отметить, что сравнительно недавно было получено принципиально важное решение проблемы построения термодинамического потенциала в зависимости не только от унарной и бинарной функций распределения, но и от всех корреляций [4]. Это позволяет в рамках единой вариационной задачи определять и термодинамические функции, и все корреляции в системе с межчастичным взаимодействием произвольного вида. В качестве одного из первых следствий этого результата была установлена связь термодинамической устойчивости системы со свойствами многочастичных корреляций.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Clive, A. Croxton. Liquid state physics. Cambridge University press. 1974. [Русс. перевод. К. Крокстон. Физика жидкого состояния. Статистическое введение. «МИР», Москва, 1978 г.]
2. Balescu, R. Equilibrium and Nonequilibrium Statistical Mechanics. New York, Wiley, 1975. [Русс. перевод. Р. Балеску. Равновесная и неравновесная статистическая механика. МИР, Москва, 1978]
3. Г. Н. Саркисов. Молекулярные функции распределения стабильных, метастабильных и аморфных классических моделей. УФН. Т. 172. 2002. № 6. С. 647-669.
4. Э. А. Аринштейн. Многочастичные плотности. ТМФ, Т. 124. 2000. № 1. С. 136-147.