ной x_1 вычисляются аналитически и вариационная задача сводится к одномерной, что позволяет повысить точность вычислений.

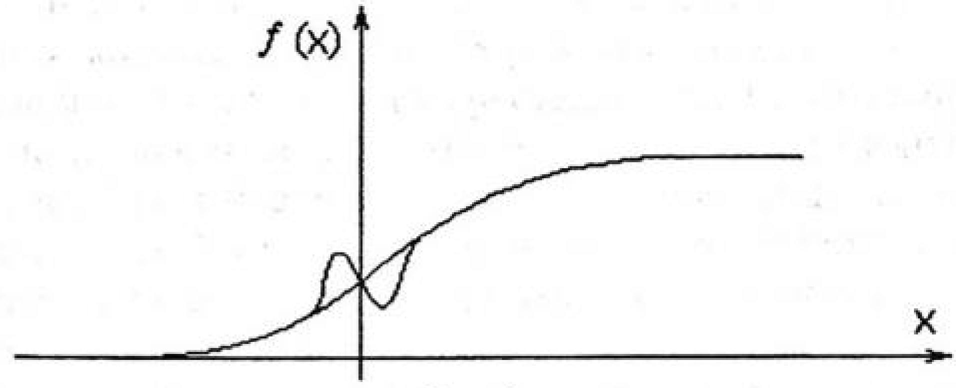

Рис. 3

Работа выполнена при поддержке Минобразования РФ, грант УР 01.01.002

ЛИТЕРАТУРА

1. Крокстон К. Физика жидкого состояния. М., 1987. 378 с.
2. Ротт Л. А. Статистическая теория молекулярных систем. М.,1979. 280 с.
3. Аринштейн Э. А., Шабаева Н. И. Поверхностная теория жидкости как функционал от структуры переходного слоя // Ф. жид. состояния. Киев, 1987. Вып. 9. С. 127-134.
4. Аринштейн Э. А., Шабаева Н. И. Нелокальные приближения теории поверхностного натяжения жидкости // Изв. вузов. Физика. 1989. № 7. С. 81-85.
5. Варгафтик Н. В. Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей. М., 1973. 617 с.

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

УДК 536.758

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ И МЕТАСТАБИЛЬНЫЕ СОСТОЯНИЯ В ТЕОРИИ ЧАСТИЧНЫХ ФУНКЦИЙ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

АННОТАЦИЯ. Рассмотрена принципиальная возможность описания метастабильных состояний в методе частичных функций распределения, эквивалентном распределению Гиббса.

The author considers a principle possibility to describe the metastable states in a method of partial distribution functions equivalent to Gibbs distribution.

Статистическая термодинамика, основанная на распределении Гиббса, выражает все термодинамические функции вещества через статистическую сумму. В квазиклассическом пределе — через статистический интеграл по фазовому пространству. При этом интеграл по всему фазовому пространству или статистическая сумма по всем возможным состояниям определяет, при заданных значениях внешних параметров, единственное равновесное состояние. Существование различных фаз и фазовых переходов может быть корректно описано только после термодинамического предельного перехода: $N \to \infty$, $V \to \infty$, $N/V=\text{const}$ [1], где N и V — число частиц и объем системы. Из того факта, что метод Гиббса определяет единственное равновесное состояние, можно, казалось бы, сделать вывод, что существование и свойства метастабильных состояний в рамках метода Гиббса описать невозможно. Подобная точка зрения проводится, например, в работе [2].

Парадокс описания метастабильных состояний в методе Гиббса решен достаточно давно [3,4]. Идея работы [4] состоит в том, что статистический интеграл может быть представлен в виде контурного интеграла, асимптотическое поведение которого (в термодинамическом пределе) определяется точками перевала подынтегральной функции. Если существует несколько точек перевала, то термодинамические функции определяются одной, самой высокой, вклад остальных экспоненциально мал (в зависимости от числа частиц N). Эти точки дают аналитическое продолжение термодинамических функций метастабильных фаз. При изменении термодинамических параметров высота точек перевала меняется, фазовое равновесие определяется условием равенства их высот. Исчезновение точки перевала соответствует спинодали. Такое описание фазовых переходов первого рода полностью соответствует эксперименту, так как реально на бинодали фаза теряет устойчивость не абсолютно, а только по отношению к другой, более устойчивой фазе.

На языке распределения Гиббса такое описание соответствует тому, что это распределение имеет не один, а несколько локальных минимумов. Устойчивая фаза определяется одним, самым глубоким, глобальным минимумом, остальные дают экспоненциально малые вклады и описывают метастабильные фазы. Более сложные фазовые переходы возникают в случае, когда интеграл по окрестности точки перевала является негауссовым, а квадратичная форма в окрестности минимума вырождается. В частности, критическое состояние возникает при слиянии двух точек перевала. Необходимо оговориться, что подход [3,4] работ не дает возможности практического, пусть даже приближенного расчета параметров точки перехода ввиду необходимости вычислять бесконечнократный статистический интеграл. Эти работы устанавливают лишь принципиальную возможность описания метастабильных состояний в методе Гиббса.

Метод частичных функций распределения эквивалентен методу Гиббса, но в этом методе рассматриваются функции от конечного, достаточно малого числа переменных. Метод является основой современной теории жидкого состояния, хотя проблема вычисления частичных функций встречает серьезные трудности, определяемые невозможностью построить достаточно точные уравнения для этих функций, содержащие конечное число операций.

Работа [2] содержит обзор некоторых часто используемых приближений для бинарной (радиальной) функции распределения. Исчезновение решений приближенных уравнений трактуется в этой работе как условие фазового перехода, определяющее бинодаль. Такой «однофазный» (по терминологии работы [2]) подход противоречит экспериментально наблюдаемым свойствам фазовых переходов, факту существования метастабильных состояний.

Решение парадокса существования метастабильных состояний в теории частичных функций распределения может быть найдено на основе вариационного принципа для частичных функций распределения [5]. Согласно этому принципу, все частичные функции устойчивого состояния определяются минимумом термодинамического потенциала как функционала от этих функций. Сильная нелинейность этого функционала приводит к тому, что возможно существование нескольких локальных минимумов, устойчивое состояние соответствует наиболее глубокому, остальные минимумы описывают метастабильные состояния. Аргументация, по существу, совпадает с аргументацией работы [4], но не на языке распределений Гиббса, а на языке частичных функций распределения.

Реальное вычисление частичных функций распределения на основе вариационного принципа требует преодоления серьезных технических трудностей [6], однако изложенные соображения остаются в силе вне зависимости от того, насколько успешно решаются технические проблемы метода.

Таким образом, последовательное использование вариационного принципа в теории частичных функций распределения позволяет правильно описать и механизм возникновения фазовых переходов, и возможность существования метастабильных состояний.

Работа выполнена при поддержке Минобразования РФ, грант УР 01.01.002.

ЛИТЕРАТУРА

1. Керзон Хуанг. Статистическая механика. М., 1966. 520 с.
2. Мартынов Г. А.. Проблема фазовых переходов в статистической механике // УФН. Т. 169. № 6. 1999. С. 595-624.
3. Мюнстер А. Теория флуктуаций // Термодинамика необратимых процессов. М., 1962. С. 36-145.
4. Гейликман Б. Т. Статистическая теория фазовых превращений. М., 1954. 119 с.
5. Аринштейн Э. А. Многочастичные плотности // ТМФ. Т. 124. № 1. 2000. С. 136-147.
6. Аринштейн Э. А., Ганопольский Р. М. Многочастичные прямые корреляции // ТМФ. Т. 131. № 2. 2002. С. 278-287.

Эдуард Абрамович АРИНШТЕЙН — профессор кафедры моделирования физических процессов и систем физического факультета, доктор физико-математических наук;
Михаил Яковлевич ФЛЯГИН — доцент кафедры моделирования физических процессов и систем, кандидат физико-математических наук

УДК 530.1

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СЛУЧАЙНЫХ СТРУКТУР

АННТОАЦИЯ. Рассмотрен метод численного моделирования случайной структуры с учетом взаимодействия ее элементов.

A method of stochastic structure numerical modeling is considered. Interaction of its elements is taken into account.

Распределение примесей или дефектов в кристалле, формирование залежей некоторых полезных ископаемых и ряд других аналогичных явлений можно рассматривать как образование случайных структур и моделировать соответствующим заполнением узлов некоторой решетки. Реальный процесс образования случайной структуры протекает через стадию диффузии атомов или иной нерегулярной миграции составляющих ее элементов, но и простейшая модель заполнения решетки путем случайного распределения заданного количества элементов по узлам может дать существенную информацию о свойствах этой структуры.

При моделировании случайной структуры используется генератор случайных чисел (ГСЧ) с постоянной плотностью распределения, входящий в стандартное программное обеспечение ПЭВМ. При размещении элементов в квадратной решетке на каждом шаге может быть использовано как одно случайное число, так и два таких числа. Для плоской квадратной решетки, содержащей N строк и N столбцов, выбор одной из N ячеек путем задания одного случайного числа можно осуществить, присвоив ячейкам первой строки номера от 1 до N, ячейкам второй строки номера от N+1 до 2N,..., ячейкам последней