

И. П. БАЗАРОВ

МЕТОД САМОСОГЛАСОВАННОГО ПОЛЯ В СТАТИСТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ КРИСТАЛЛА *

Устанавливается применимость и указывается перспективность метода самосогласованного поля в теории кристаллического состояния.

§ 1. Постановка задачи

Одним из наиболее эффективных методов статистического изучения многочастичных систем является метод корреляционных функций распределения [1]. $F_s(q_1, q_2, \dots, q_s)$ ($s=1, 2, \dots$) ($\frac{1}{V_s} F_s(q_1, \dots, q_s) dq_1, \dots, dq_s$ определяет вероятность нахождения данной группы s частиц в малых объемах dq_1, dq_2, \dots, dq_s возле точек, определяемых векторами q_1, q_2, \dots, q_s , (декартовы координаты вектора q обозначаются через q^α , где $\alpha=1, 2, 3$); N — число частиц системы в объеме V).

Функции $F_s(q_1, q_2, \dots, q_s)$ выражаются через координационную часть распределения Гиббса $D(q_1, q_2, \dots, q_N)$:

$$F_s(q_1, q_2, \dots, q_s) = V^s \int_V \dots \int_V D(q_1, \dots, q_N) dq_{s+1}, \dots, dq_N \quad (1)$$

и связаны между собой цепочкой уравнений Боголюбова. Первое уравнение этой цепочки — уравнение для одночастичной функции распределения $F_1(q)$ — имеет вид

$$\theta \frac{\partial F_1(q)}{\partial q^\alpha} + \frac{1}{v} \int \frac{\partial \Phi(|q - q'|)}{\partial q^\alpha} F_2(q, q') dq' = 0 \quad (2)$$

($\theta = kT$, T — абсолютная температура, $v = \frac{V}{N}$, $\Phi(|q|)$ — потенциал парного взаимодействия).

Трудности вычисления многократного интеграла (1) при нахождении F_s заставляют обратиться к уравнениям вида (2) для этих функций. Однако, как непосредственно видно из уравнения (2), его решение не представляется возможным, так как оно кроме $F_1(q)$ содержит также неизвестную бинарную функцию распределения $F_2(q, q')$. Это приводит к

* Работа доложена на Ломоносовских чтениях в МГУ.

необходимости расщепления цепочки уравнений Боголюбова и получения, например, в случае (2), замкнутого уравнения для $F_1(q)$.

Так, если пренебречь парной корреляцией между частицами и положить

$$F_2(q, q') = F_1(q) F_1(q'), \quad (3)$$

то получим для $F_1(q)$ замкнутое нелинейное уравнение с самосогласованным полем

$$\theta \ln c F_1(q) + \frac{1}{v} \int \Phi(|q - q'|) F_1(q') dq' = 0 \quad (4)$$

или

$$\theta \ln \lambda \rho(q) + \int \Phi(|q - q'|) \rho(q') dq' = 0, \quad (5)$$

где $\rho(q) = \frac{1}{v} F_1(q)$ — плотность числа частиц, λ и c — нормировочные постоянные соответственно функций $\rho(q)$ и $F_1(q)$ ($\lambda = cv$), $\int \Phi(|q - q'|) \rho(q') dq' = u(q)$ — самосогласованный потенциал.

Уравнение (5) было впервые установлено из интуитивных соображений А. А. Власовым; соответствующее уравнение для одночастичной временной функции распределения $F_1(q, p, t)$ называется кинетическим уравнением Власова [2, 3], а сам способ интегрального учета взаимодействия носит название метода самосогласованного поля.

Кинетическое уравнение Власова было предложено для изучения плазмы вместо известного газокинетического уравнения Больцмана (учитывающего взаимодействие между частицами только посредством удара), поскольку в плазме главную роль играют кулоновские (медленно спадающие с расстоянием) силы, действующие на «далеких» дистанциях (превышающих среднее расстояние между частицами).

Применение А. А. Власовым [4] уравнения с самосогласованным полем (5) к системе частиц с короткодействующими силами взаимодействия (интеграл от потенциала которых, взятый по бесконечному пространству, сходится), и при том для тел в жидком и кристаллическом состояниях было встречено резкой критикой [5, 6, 7]. В работе [5] обосновывалась неправомерность применения метода самосогласованного поля для короткодействующих сил в случае тел большой плотности при низких температурах, т. е. в теории твердого тела. В работе [6] доказывалась неприменимость этого метода в теории кристаллического состояния на основе недопустимости в данном случае условия (3).

Используя при исследовании точного временного уравнения для $F_1(q, p, t)$ разложение по степеням малости энергии взаимодействия, в монографии [1] доказано, что в случае, когда можно пренебречь короткодействующими силами отталкивания и принять идеализацию, в которой мы отказываемся от учета непроницаемости молекул и сглаживаем ход потенциальной функции в окрестности $r=0$ таким образом, что $\Phi(r)$ оказывается малой по сравнению со средней кинетической энергией молекулы \bar{T} , уравнением первого приближения является уравнение с самосогласованным полем. Этим устанавливалась определенная область применимости (возможность пренебрежения силами отталкивания):

$$\Phi(r) \ll \bar{T} \quad (6)$$

уравнения (5), однако отнюдь не доказывалась единственность этой области.

В работе [7] неправомерность применения уравнения (5) к кристаллу обосновывалась не выполнением для него критерия (6), что неявно предполагает единственность найденной в [1] области применимости уравнения (5).

Нельзя также не отметить, что если в оценке неприменимости уравнения с самосогласованным полем в теории твердого тела авторы работ [5] и [7] едины, то в отношении применения этого уравнения к обычным газам они стоят на совершенно противоположных позициях: в работе [5] утверждается, что применение уравнения с самосогласованным полем может быть оправдано для газа, близкого к идеальному, в работе же [7], наоборот, говорится о заведомой неприменимости этого уравнения к газам. Учитывая также, что в монографии [3] уравнение (5) рассматривается как точное, применимое во всех случаях, мы приходим к выводу, что в целом вопрос о применимости уравнения с самосогласованным полем (5) не является простым и его решение приобретает важное значение.

В ответ на возражения против применения метода самосогласованного поля к кристаллу в работе [3] была выдвинута концепция нелокализованных частиц, которая, однако, не привела к правильному решению вопроса. Таким образом, несмотря на все эти фундаментальные работы [2—7] о применении к кристаллу метода самосогласованного поля, этот вопрос в настоящее время не является решенным. Между тем правильное его решение имеет большое значение в теории твердого тела.

В этом сообщении мы ставим своей задачей: 1) обсудить и решить общий вопрос о применимости уравнения с самосогласованным полем к различным системам; 2) установить, что уравнение с самосогласованным полем помимо области применимости, установленной Н. Н. Боголюбовым [1] и определяемой критерием (6), имеет и другую область применимости, к которой относятся такие системы, как кристалл, для которых критерий (6) не выполняется; 3) указать перспективы правильного применения метода самосогласованного поля в теории твердого тела и вообще в проблеме многих частиц.

§ 2. О применимости уравнения с самосогласованным полем к различным системам

Как видно из вывода уравнения с самосогласованным полем (5), общим условием его применимости является выполнение аппроксимации (3), при которой пренебрегается парная корреляция между частицами. В плазме это условие хорошо выполняется (при расстояниях между частицами больше среднего расстояния между ними) благодаря дальнедействующему характеру кулоновских сил, при котором поведение каждой заряженной частицы в основном определяется одновременным ее взаимодействием сразу с целым коллективом частиц, а не с какой-либо одной из них; это обуславливает также и выполнение критерия (6).

Как было показано в [1], условие (3) не имеет места в случае обычного газа с короткодействующими межмолекулярными силами взаимодействия и поэтому его поведение определяется не кинетическим уравнением Власова, а кинетическим уравнением Больцмана. Аппроксимацию (3), а следовательно и уравнение (5), нельзя применять и для жидкости, так как ее частицы часто сближаются на дистанции меньше

среднего расстояния между ними, испытывая все это время значительные силы отталкивания, и поэтому при короткодействующем характере молекулярных сил движение каждой частицы жидкости определяется в основном ее взаимодействием с другой отдельной частицей; критерий (6), согласно которому при движении частиц жидкости можно пренебречь силами отталкивания, здесь также не выполняется (энергия взаимодействия между частицами жидкости порядка энергии теплового движения).

Что касается кристалла, то хотя в этом случае так же, как и в жидкости нельзя пренебречь силами отталкивания и поэтому критерий (6) тоже не выполняется, однако в кристалле это не имеет никакого значения, так как его частицы при колебаниях в узлах решетки не сближаются на такие расстояния, чтобы могли проявиться большие отталкивания силы, как бы велики они не были в окрестности $r=0$. Движение частицы кристалла в каждый момент времени определяется ее взаимодействием не с какой-либо одной соседней частицей, а одновременным коллективным взаимодействием со всеми окружающими ее соседями. Это приводит к тому, что хотя критерий (6) для частиц кристалла не имеет места, общее условие (3) для всей области их движения хорошо выполняется и поэтому уравнение самосогласованного поля (5) оказывается хорошим приближением для кристалла.

Отсюда следует, что уравнение (5) помимо области применимости, установленной Н. Н. Боголюбовым [1] и определяемой критерием (6), имеет и другую область применимости, к которой относится кристалл, для которого критерий (6) не выполняется, но хорошо выполняется общее условие (3) мультипликативности бинарной функции распределения для всей области движения его частиц.

На чем же тогда основаны возражения о неприменимости метода самосогласованного поля в теории твердого тела?

Возражение о недопустимости в случае кристалла условия (3), как видим, не является правильным, неверно и возражение, основанное на невыполнении здесь критерия (6), поскольку этот критерий в кристалле «не работает». Что же касается других возражений, то они связаны с общим физическим дефектом, к которому приводит уравнение (5) и который возникает при его «выводе» из точного уравнения (2) с помощью условия (3).

Этот общий физический дефект уравнения (5), являющийся своеобразной «платой» за замену цепочки уравнений для корреляционных функций распределения одним замкнутым уравнением для одночастичной функции F_1 , состоит в следующем. Как известно, входящая в уравнение (2) бинарная функция распределения определяет вероятность положения в фазовом пространстве двух частиц статистической системы. Для реальных частиц эта вероятность равна нулю при $|q-q'| \leq d$, где d — расстояние, зависящее от скорости относительного движения частиц и имеющее порядок величины «диаметра» частиц. Поэтому вклад в энергию межчастичного взаимодействия равновесной системы

$$U = \frac{N(N-1)}{2V^2} \int \Phi(|q-q'|) F_2(q, q') dq dq', \quad (7)$$

состояний с $|q-q'| \leq d$ весьма мал, хотя функция $\Phi(|q-q'|)$ при этом велика.

В уравнении (5) эта ситуация совершенно не учитывается. Физически это приводит к тому дефекту уравнения (5), что при вычислении энергии системы с помощью этого уравнения мы наряду с энергией взаимодействия частиц при больших расстояниях между ними

($|q - q'| > d$) начинаем учитывать на равных условиях энергию взаимодействия при произвольно малых значениях разности $|q - q'|$ и даже собственную энергию частиц.

В плазме (при $\Phi(r) \approx \frac{1}{r}$) этот дефект уравнения (5) на малых расстояниях между частицами не дает заметного вклада в энергию и, следовательно, в этом отношении не существен. Зато для молекулярных систем он приводит к нелепому результату — энергия и другие величины этих систем при вычислении по (7) в приближении самосогласованного поля существенно зависят от характера взаимодействия при бесконечно малом расстоянии между частицами.

Однако в отличие от жидкости и газа эту трудность с дефектом уравнения (5) в случае кристалла удается обойти и развить такой способ решения этого уравнения для самосогласованного потенциала $u(q)$, который при использовании сильно коррелированного пространственно периодического расположения частиц кристалла автоматически приводит к правильному (без эффекта собственной энергии частиц) значению свободной энергии кристалла. Это оказалось возможным сделать, сведя решение уравнения (5) к вариационной задаче о нахождении минимума функционала для свободной энергии $F\{u\}$ и явно учитывая невозможность сближения частиц кристалла на сколь угодно малые расстояния. При вычислении энергии кристалла по (7) в приближении самосогласованного поля решение задачи с помощью функционала $F\{u\}$ математически эквивалентно учету условия $|q - q'| \geq d$, или обрезанного потенциала взаимодействия на малых расстояниях* — от нуля до минимального сближения d колеблющихся частиц кристалла, точно определяемого уравнением (5) ($\Phi(r) = 0$ при $0 \leq r \leq d$). Это, конечно, ни в коей мере не означает, что при применении метода самосогласованного поля к кристаллу рассматривается модель частиц без отталкивательных сил на малых расстояниях, так как параметр обрезания потенциала d находится вариационным методом при полном учете этих сил.

Возможность определения правильного значения термодинамических величин кристалла методом самосогласованного поля устанавливает применимость этого метода в теории твердого тела, вопреки противоположному выводу (5), сделанному до того, как был предложен основанный на вариационном принципе способ решения уравнения самосогласованного поля, который, используя явную связь этого уравнения с термодинамикой и представление о пространственно периодическом расположении частиц кристалла, позволяет в рамках самого метода без каких-либо дополнительных предположений автоматически устранить для кристалла дефект, связанный с уравнением (5) (точнее с условием (3), приводящим к уравнению (5)). С другой стороны, если применять к кристаллу уравнение самосогласованного поля без учета особенности строго локализованного движения частиц кристалла [3, 4], то легко прийти к абсурдным результатам, резко расходящимся с опытом, как это критикуется в работах [5, 6, 7].

В случае жидкости и газа вариационный способ нахождения термодинамических функций этих систем методом самосогласованного поля без собственной энергии частиц невозможен, так как в этом случае при использовании (7) метод не позволяет указать величину параметра обрезания потенциала в нуле. Однако, беря значение этого параметра

* Будем называть такую операцию при определении правильного значения энергии кристалла с помощью (7) в приближении самосогласованного поля устранением дефекта, связанного с этим приближением.

из дополнительных физических соображений, можно использовать метод самосогласованного поля и для приближенного описания поведения жидкости и газа; получаемые при этом результаты, как будет показано в другой работе, оказываются верными качественно и по порядку величины*.

§ 3. Термодинамика в приближении самосогласованного поля и теплоемкость кристалла в этом приближении

Найдем свободную энергию системы в приближении самосогласованного поля. Для этого будем исходить из статистического вариационного принципа Боголюбова.

Согласно этому принципу, если полную энергию взаимодействия между частицами системы

$$K = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \Phi(q_i - q_j) \quad (7a)$$

разделить на две части K_0 и K_1 , то свободная энергия системы равна

$$F \leq \bar{F} = F_0 + \langle K_1 \rangle_0, \quad (8)$$

где F_0 — свободная энергия при энергии K_0 , а $\langle K_1 \rangle_0$ — усредненное по ансамблю с K_0 значение энергии $K_1 = K - K_0$.

Чтобы не учитывать каждый раз в (7) и (8) условие $i \neq j$, можно выражение для энергии взаимодействия (7a) записать в виде

$$K = \frac{1}{2} \sum_{i,j}^N \Phi(q_i - q_j), \quad (7b)$$

где при вычислении суммы надо положить**

$$\Phi(0) = 0. \quad (9)$$

Возьмем в качестве K_0 аддитивную функцию вида:

$$K_0 = \sum_i u(q_i), \quad (10)$$

где $u(q)$ — некоторый индивидуальный потенциал, в поле которого находится каждая частица. Тогда \bar{F} будет функционалом $u(q)$:

$$\bar{F}(u) = F_0 + \left\langle K - \sum_i u(q_i) \right\rangle_0,$$

где

$$F_0 = -\theta \ln Q_0,$$

* Исследование жидкости и газа на основе уравнения с самосогласованным полем с устраненным дефектом, осуществленным с помощью дополнительных физических предположений, выходя за рамки метода самосогласованного поля, представляет собой по существу измененный метод самосогласованного поля. Однако и в этом случае можно говорить о методе самосогласованного поля, или о модифицированном методе самосогласованного поля.

** Заметим, что принимая (9) мы отнюдь не предполагаем, что потенциал взаимодействия $\Phi(r)$ обращается в нуль при $r=0$; мы используем (9) лишь как математический прием для того, чтобы в выражении (7b) не учитывать того, что в нем, согласно (7a), не содержится.

$$Q_0 = \frac{1}{N!} \int e^{-\frac{k_0}{\theta}} d\tau = \left(\frac{e}{N} \int e^{-\frac{u(q)}{\theta}} dq \right)^N,$$

$$\left\langle \sum_i u(q_i) \right\rangle_0 = N \frac{\int u(q) e^{-\frac{u(q)}{\theta}} dq}{\int e^{-\frac{u(q)}{\theta}} dq},$$

$$\langle K \rangle_0 = \frac{N(N-1)}{2} \frac{\int \Phi(|q-q'|) e^{-\frac{1}{\theta}(u(q)+u(q'))} dq dq'}{\left(\int e^{-\frac{u(q)}{\theta}} dq \right)^2}.$$

Таким образом,

$$\begin{aligned} \bar{F}(u) = & -N\theta \ln \frac{e}{N} \int e^{-\frac{u(q)}{\theta}} dq + \\ & + \frac{N(N-1)}{2} \frac{\int \Phi(|q-q'|) e^{-\frac{1}{\theta}(u(q)+u(q'))} dq dq'}{\left(\int e^{-\frac{u(q)}{\theta}} dq \right)^2} - N \frac{\int u(q) e^{-\frac{u(q)}{\theta}} dq}{\int e^{-\frac{u(q)}{\theta}} dq}. \end{aligned} \quad (11)$$

Минимизируя (11), из условия $\frac{\delta \bar{F}}{\delta u(q)} = 0$ находим уравнение (5).

Таким образом, мы получаем, что решение уравнения самосогласованного поля (5) эквивалентно вариационной задаче о нахождении минимума функционала свободной энергии (11), который, следовательно, представляет собой свободную энергию системы в приближении самосогласованного поля и содержит всю термодинамику в этом приближении. Это приводит к возможности правильного определения (без эффекта собственной энергии частиц) самосогласованного потенциала $u(q)$ и других величин кристалла, исходя из (11). Такое вычисление характеристик кристалла будет дано в другой работе. Здесь же мы, основываясь на такого рода возможности устранения дефекта уравнения (5) в рамках метода самосогласованного поля, найдем эти величины, решая непосредственно уравнение (5).

Нетрудно убедиться, что уравнение (5) имеет при всех температурах (включая и $\theta=0$) пространственно однородное решение:

$$\rho = \frac{N}{V}, \quad u(q) = \frac{N}{V} \int \Phi(|q|) dq. \quad (12)$$

Однако хорошо известно, что потенциальная энергия взаимодействия двух атомов $\Phi(|q|)$ при определенном q имеет минимум. Поэтому и индивидуальный потенциал $u(q)$ в некоторых условиях тоже может иметь минимумы при значениях q , определяемых из уравнений

$$\frac{\partial u(q_i)}{\partial q^\alpha} = 0, \quad \frac{\partial^2 u(q_i)}{\partial q_i^\alpha \partial q^\beta} > 0. \quad (13)$$

Но тогда из (5), которое мы запишем в виде

$$\rho(q) = N \left[\int \exp \left\{ -\frac{u(q)}{\theta} \right\} dq \right]^{-1} \exp \left(-\frac{u(q)}{\theta} \right),$$

непосредственно видно, что при $\theta=0$ это уравнение может иметь перио-

дическое решение в виде суммы δ -функций*

$$\rho_0(q) = \sum_i \delta(q - q_i), \quad (14)$$

соответствующее расположению атомов в узлах пространственной решетки. Потенциал $u(q)$ имеет ту же периодичность и равен

$$u(q) = \int \Phi(|q - q'|) \rho_0(q') dq' = \sum_i \Phi(|q - q_i|), \quad (15)$$

причем $u(q_i) = u(q_j) = u_0$ в силу равноправности всех узлов решетки.

Потенциальная энергия K_0 , определяемая найденным из решения уравнения (5) индивидуальным потенциалом (15), будет

$$K_0 = \sum_j u(q_j) = \sum_{i,j} \Phi(|q_i - q_j|) = 2K,$$

что приводит в (9) к равенству. Это означает, что при температуре абсолютного нуля уравнение с самосогласованным полем (5) является для кристалла точным (подобно тому, как оно является точным для идеального газа при любых температурах).

Если решение (14) приводит к минимуму потенциальной энергии системы, то, следовательно, при данных условиях мы имеем кристалл и решение (12) должно быть отброшено.

Для того чтобы показать, насколько хорошо применимо уравнение (5) к «горячему» кристаллу ($\theta > 0$), найдем его решение для отличных от нуля температур. Имея в виду, что атомы в кристалле при небольших температурах совершают малые колебания, мы можем принять решение (14) за нулевое приближение для $\rho(q)$ при этих температурах кристалла. Учítывая (13), находим, что создаваемый распределением (14) потенциал $u(q)$ вблизи j -го узла решетки в гармоническом приближении равен

$$u(q) = \sum_{i=1}^N \Phi(|q - q_i|) = u(q_j) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \frac{\partial^2 u(q_j)}{\partial q_j^\alpha \partial q_j^\beta} (q^\alpha - q_j^\alpha) (q^\beta - q_j^\beta). \quad (16)$$

Подставляя (16) в (5), получим для $\rho(q)$ при q , близком к q_j , выражение

$$\rho(q) = \lambda' \exp \left\{ -\frac{1}{\theta} \left[u(q_j) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \frac{\partial^2 u(q_j)}{\partial q_j^\alpha \partial q_j^\beta} (q^\alpha - q_j^\alpha) (q^\beta - q_j^\beta) \right] \right\}, \quad (17)$$

а при любом q будем иметь

$$\rho(q) = \lambda' \sum_j \exp \left\{ -\frac{1}{\theta} \left[u(q_j) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \frac{\partial^2 u(q_j)}{\partial q_j^\alpha \partial q_j^\beta} (q^\alpha - q_j^\alpha) (q^\beta - q_j^\beta) \right] \right\} \\ \left(\lambda' = \frac{1}{\lambda} \right).$$

Так как

$$\frac{\partial^2 u(q_j)}{\partial q_j^\alpha \partial q_j^\beta} = \frac{\partial^2 u(q_k)}{\partial q_k^\alpha \partial q_k^\beta} = F_{\alpha\beta},$$

то, обозначая $q - q_j = x$ и приводя с помощью линейного преобразования $x^\alpha = \sum_\gamma c^{\alpha\gamma} \cdot y^\gamma$ ($c^{\alpha\gamma}$ — ортогональная матрица) квадратичную форму $\sum_{\alpha, \beta} F_{\alpha\beta} x^\alpha x^\beta$

к виду $\sum_{\lambda=1}^3 f_{\lambda} y_{\lambda}^2$ (где f_{λ} определяются как корни характеристического уравнения $\text{Det} \|F_{\alpha\beta} - \lambda \delta_{\alpha\beta}\| = 0$), получим

$$\rho(q) = \lambda' \sum_j \exp \left\{ -\frac{1}{\theta} \left[u(q_j) + \frac{1}{2} \sum_{\lambda} f_{\lambda} y_{\lambda}^2 \right] \right\}$$

(постоянная λ' определяется из условия нормировки). Окончательно получаем следующее решение уравнения (5) для горячего кристалла

$$\rho(q) = \frac{\sqrt{f_1 \cdot f_2 \cdot f_3}}{(2\pi\theta)^{3/2}} \sum_j \exp \left\{ -\frac{1}{2\theta} \sum_{\alpha,\beta} F_{\alpha\beta} \cdot (q^{\alpha} - q_j^{\alpha})(q^{\beta} - q_j^{\beta}) \right\}, \quad (18)$$

а равновесная функция распределения $f_0(q, p)$ атомов кристалла будет

$$f_0(q, p) = B \cdot \rho(q) \cdot e^{-\frac{p^2}{2m\theta}}, \quad (19)$$

где B находится из условия нормировки

$$\int B \cdot \exp \left\{ -\frac{p^2}{2m\theta} \right\} dp = 1.$$

Зная функцию распределения (19), мы можем определить равновесные свойства кристалла при его классическом рассмотрении. Найдем, например, калорическое уравнение состояния одноатомного кристалла, т. е. выражение для его внутренней энергии

$$E = \int \frac{p^2}{2m} f_0(q, p) dq dp + \frac{1}{2} \int \Phi(|q - q'|) \rho(q) \rho(q') dq dq' = 3N\theta + K. \quad (20)$$

Нетрудно видеть, что (20) приводит к закону Дюленга и Пти для атомной теплоемкости. Этим устанавливается хорошая применимость уравнения (5) для горячего кристалла: температурная поправка к внутренней энергии кристалла $\Delta E = E - K = 3N\theta$, даваемая методом самосогласованного поля, равна, согласно (20), соответствующей величине, вычисленной методом Гиббса. Физической основой применимости метода самосогласованного поля к кристаллу является то, что при $T=0$ решение уравнения (5) в виде суммы δ -функций является для кристалла точным, а при $T>0$ вплоть до температуры плавления «размазка» δ -функций, как мы покажем, относительно мала (0,1 расстояния между ближайшими соседями кристалла), так что каждая частица кристалла все время движется в поле «далеких» сил, когда на нее одновременно действует целый коллектив соседей и поэтому парной корреляцией с большой точностью можно пренебречь.

§ 4. Перспективы правильного применения метода самосогласованного поля в теории твердого тела, жидкости и газа

Решение принципиального вопроса о применении метода самосогласованного поля в теории твердого тела позволяет решить ряд важнейших вопросов как в теории кристаллического состояния, так и в теории жидкости и газа. Приведем некоторые из них.

Построить термодинамику кристалла в приближении самосогласованного поля.

Развить теорию ангармонических эффектов в кристаллах.

Построить статистическую теорию фазового перехода кристалл—жидкость.

Статистически обосновать при некоторых дополнительных предположениях ранее известные эмпирические правила и установить новые закономерности и связи между различными параметрами, характеризующими твердое тело, жидкость и газ.

Развить приближенную теорию переходного межфазного слоя и поверхностного натяжения.

Решение этих вопросов будет дано в других работах.

В заключение выражаю глубокую благодарность акад. Н. Н. Боголюбову за обсуждение настоящей статьи.

ЛИТЕРАТУРА

1. Боголюбов Н. Н. Проблемы динамической теории в статистической физике. М., Гостехиздат, 1946.
2. Власов А. А. ЖЭТФ, 8, 291, 1938.
3. Власов А. А. Теория многих частиц. М., Гостехиздат, 1950.
4. Vlasov A. A. J. of Phys., 9, 26, 1945; 9, 190, 1945.
5. Гинзбург В., Ландау Л., Леонтович М., Фок В. ЖЭТФ, 16, 246, 1946.
6. Тябликов М. В. ЖЭТФ, 20, 16, 1950.
7. Широков М. В. ЖЭТФ, 24, 601, 1953.

Поступила в редакцию
1. 6 1965 г.

Кафедра
теоретической физики