

**РОЗВИТОК МЕТОДІВ СТАТИСТИЧНОЇ ФІЗИКИ
У РОБОТАХ АКАДЕМІКА ЮХНОВСЬКОГО****Ігор МРИГЛОД*

Інститут фізики конденсованих систем НАН України,
вул. Свенціцького 1, Львів 76011
e-mail: mryglod@icmp.lviv.ua

Редакція отримала статтю 10 травня 2011 р.

Ця стаття приурочена до 85-ї річниці академіка І.Р. Юхновського і має на меті короткий аналіз основних методів, розвинутих ним в галузі статистичної фізики багаточастинкових систем. Наголошено на оригінальній методиці знаходження розв'язку рівнянь Боголюбова у вигляді розвинень за плазмовим параметром, можливостях методу колективних змінних, концепції системи відліку і непертурбативному варіанті теорії фазових переходів другого роду.

1 вересня 2010 р. зустрів своє 85-ліття академік НАН України І.Р. Юхновський – фізик-теоретик, державний і громадський діяч, дійсний член Наукового товариства ім. Шевченка, Герой України, людина, яка для нас – його учнів – назавжди залишатиметься Вчителем з великої літери. Життєва дорога Ігора Рафаїловича – багата, цікава і повчальна водночас [1, 2]. Коли спробувати проаналізувати її, то може скластися враження, що все у ній складалося просто і доладно, що доля завжди була прихильною до нього, а обставини сприятливими. Мабуть так завжди думається, коли бачиш поважний результат [3, 4, 5], а щоденна і важка праця залишилася десь далеко позаду як приємний спогад. Проте за таким ілюзорним одкровенням ховається зазвичай головне – саме те, що складає сутність життя і його сенс, його наповнення і виправдання. І вимір успіху Ігора Рафаїловича не в тому, чого він досяг за числом відзнак, звань і нагород, а радше в іншому – як він жив і живе щохвилини впродовж багатьох років, які пріоритети і мотивація ним керують у буденних ситуаціях, хто з ним крокує поруч і готовий продовжити справу, що стала мірилом усього життя.

*PACS numbers: 01.65.+g; 05.20.-y

*За матеріалами доповіді на Наукових читаннях (31 серпня – 1 вересня 2010 р.), які були приурочені 85-річчю академіка НАН України І.Р. Юхновського і проходили в Інституті фізики конденсованих систем НАН України.

Метою цієї статті є спроба виділити те основне, що на думку автора лягло у фундамент здобутків академіка Юхновського як фізика-теоретика, залишаючи обабіч його подвижницьку працю на державних посадах і громадську діяльність; проаналізувати те, навколо чого виросла велика когорта учнів і послідовників. Зрозуміло, що навіть таке обмежене завдання не є з легких і важко тут претендувати на повноту. Тому весь подальший виклад ґрунтується на особистому сприйнятті внеску у статистичну фізику цього талановитого вченого і видатного організатора науки, з яким автору поталанило спілкуватися і тісно співпрацювати впродовж майже 30 років.

1. ЕТАПИ НАУКОВОГО ШЛЯХУ

Син службовця, який походив із давнього роду священиків; уродженець Волині, де тоді уже на побутовому рівні відчувався кількавіковий вплив Росії і де вперто зберігалось, водночас, автентичне українське коріння; учень ліцею у м.Крем'янці, жителі якого хлібом-сіллям зустрічали радянські війська у 1939 році, а згодом деякі з них знайшли свою смерть у катівнях НКВД ще задовго до початку Великої вітчизняної; солдат Другої світової, що розпочалася для мешканців Західної України значно раніше від 1941 року, а згодом засновник та організатор об'єднання ветеранів, які пережили війну, будучи часто по різні боки прицілу гвинтівки; спраглий знань студент-солдат, який розпочав свої університетські студії із повторення основ елементарної математики, а завершував їх, читаючи праці фізика-теоретика і математика світової слави Миколи Боголюбова [6]; амбітний молодий вчений, який брався за архіскладні задачі теорії багаточастинкових систем і вже тоді виробив свій алгоритм успіху – важка і постійна праця, насолода від результату, здоровий спосіб життя і безмежний оптимізм. Мабуть так у найкоротший спосіб можна описати той період життя І.Р. Юхновського, який передував захисту ним кандидатської дисертації [7] у 1954 році і здобуттю його першого наукового ступеня.

Дисертаційна робота І.Р. Юхновського “Бінарна функція розподілу для систем взаємодіючих заряджених частинок” на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю “теоретична і математична фізика” була підготовлена у вигляді рукопису і захищена під керівництвом Абби Юхимовича Глаубермана у 1954 році. Ця робота підсумовувала перші результати наукових досліджень Ігора Юхновського – тоді ще молодого вченого – і фактично заклала основи для майбутніх досліджень численних його учнів. Базувалася вона на ідеях і методах М.М. Боголюбова, який буквально в перші повоєнні роки опублікував свої відомі книжки “Проблеми динамической теории в статистической физике” (1946) та “Лекції з квантової статистики” (1949), які фактично змінили напрям розвитку і методологію теорії конденсованої речовини чи, висловлюючись більш образно, змінили ландшафт цієї науки. Для учнів і послідовників Ігора Рафаїловича рукопис цієї дисертації став одним із тих перших підручників, які разом із згаданими вище книжками Миколи Боголюбова формували список найбільш необхідного для входження у царину теоретичних досліджень. Потім цей список доповнювався і видозмінювався, але тривалий час саме ці три джерела були засадничими в ньому.

З них аспіранти і пошукувачі дізнавалися про термінологію, отримували знання про основні методи і вивчали апарат статистичної фізики. Розпочався новий етап – творення і наукових пошуків, роботи з учнями і розбудови школи – Львівської школи статистичної фізики, яка з часом отримала міжнародне визнання і авторитет.

Наприкінці 50-х, будучи ще кандидатом наук, І.Р. Юхновський очолював кафедру теоретичної фізики Львівського державного університету ім. Івана Франка. Це давало змогу щоденно спілкуватися зі студентами та аспірантами, а також визначати тенденції у науковій роботі кафедри. Основним напрямом досліджень стала статистична теорія систем заряджених частинок. Техніка функцій розподілу та ідея розвинень за плазмовим параметром, запропоновані Боголюбовим і використані у кандидатській дисертації Юхновського, відкрили широкі можливості для продовження досліджень. Тоді ж Ігор Рафаїлович багато працює над тим, щоб зрозуміти і знайти нові математичні підходи для опису густих систем, у яких відсутній малий параметр, де сильними є колективні ефекти, а кореляційні явища визначають властивості системи. Так згодом був сформульований метод колективних змінних, який дав змогу розв'язати цілу низку складних математичних проблем, зокрема коректно і рівноправно врахувати конкурентні коротко- і далекосяжні взаємодії.

У 1965 році Ігор Рафаїлович захистив дисертацію “Статистична теорія систем заряджених частинок” на здобуття ступеня доктора фізико-математичних наук. А ще за кілька років, навесні 1969-го, у Львові було створено відділ статистичної теорії конденсованих станів¹ (СТеКС) київського Інституту теоретичної фізики (ІТФ) АН УРСР, яким керував на той час академік М.М. Боголюбов. Фактично цей відділ став першим на Західній Україні академічним підрозділом, що спеціалізувався у галузі фундаментальних проблем фізики. Щоб уявити масштаб завдань, поставлених тоді І.Р. Юхновським, можна навести лише один приклад. На момент створення відділу СТеКС у ньому працювало лише два співробітники – власне Ігор Рафаїлович та лаборант відділу. Але вже в 1980 році на базі цього відділу, у якому налічувалося тоді близько трьох десятків дослідників (головно учнів Юхновського), було створено Львівське відділення статистичної фізики ІТФ АН УРСР у складі трьох відділів. Ще за 10 років у вересні 1990 року на основі цього колективу утворено окремий академічний інститут – Інститут фізики конденсованих систем, у штаті якого нині біля 100 працівників, а ще понад 10 дослідників навчаються в аспірантурі та в докторантурі.

2. СТАТИСТИЧНА ФІЗИКА ДО ПОЧАТКУ 50-Х РОКІВ

Статистична механіка як розділ теоретичної фізики, що розробляє математичний інструментарій для вивчення великої популяції частинок (складових системи) і дає змогу встановити зв'язок між індивідуальними характеристиками частинок і типом взаємодій між ними та термо-

¹Вперше офіційно термін “конденсована речовина” був використаний офіційно Нобелівським лауреатом з фізики (1977) Філіпом Андерсеном, який у 1967 році перейменував свою дослідницьку групу в Кавендишській лабораторії Кембриджського університету.

динамічними макроставностями системи в цілому, була ініційована роботами австрійського фізика Людвіга Больцмана наприкінці XIX століття. Оригінальні роботи Больцмана зі статистичної інтерпретації термодинаміки, доведення Н-теорема, теорії переносу і рівняння стану для газів стимулювали теоретиків до розбудови основ статистичної фізики та переосмислення завдань теорії.

У 1902 році була опублікована фундаментальна праця американського фізика-теоретика, хіміка і математика Джозая Вілларда Гіббса, у якій сформульовано основні принципи статистичної термодинаміки і запроваджено концепцію ансамблів, що створило строгий математичний фундамент для рівноважної статистичної механіки.

Послідовний підхід до побудови нерівноважної статистичної теорії, що стартує з рівняння Ліувілля і ланцюжка рівнянь для частинкових функцій розподілу, було розвинуто в роботах Миколи Миколайовича Боголюбова наприкінці 40-х років.

Успіхи в розвитку математичного апарату статистичної фізики стимулювали інтенсивні дослідження багаточастинкових систем, зокрема газів. З іншого боку, ці ідеї суттєво вплинули на розвиток теорії твердих тіл, так зокрема на початку XX століття були запропоновані моделі Айнштайна (1907), а згодом і Дебая (1912) для обчислення теплоємності твердих тіл. Періодична кристалічна структура твердих тіл дозволяла суттєво спростити розрахунки і, таким чином, до кінця 50-х років основи теорії твердих тіл, що базувалася на статистичному підході, квантовій механіці та теорії груп, були фактично сформульовані. Суттєвим елементом у розвитку статистичної фізики багаточастинкових систем стали квантові теорії надплинності і надпровідності, які органічно довершили побудову основ теорії в ідейному плані.

Очевидно, що такі успіхи у розвитку статистичної фізики дозволили чіткіше і предметніше сформулювати нові актуальні проблеми, які стосувалися як математичних обґрунтувань певних важливих аспектів теорії (ергодичність, вихід на рівновагу і гіпотеза про ієрархію часів релаксації, нерівноважна макродинаміка, тощо), так і конкретних її застосувань до певних фізичних об'єктів (рідини, багатокомпонентні та полідисперсні плинні, комплексоутворюючі системи, тощо).

Одним із актуальних напрямів досліджень, що почав активно розвиватися в середині 50-х, стали рідини та розчини електролітів. Складність їх теоретичного опису була пов'язана із цілою низкою факторів, які фактично характеризують властивості багатьох систем, що відносяться нині до об'єктів м'якої речовини². М'якій речовині притаманні такі риси як висока чутливість до слабких зовнішніх чинників, багатомасштабність (просторова і часова) та структурна складність, зокрема схильність до утворення асоціатів та дисипативних структур і значна роль ентропійних чинників. Кожна із цих характеристик

²Термін "м'яка речовина" ввів у науковий обіг у 80-х роках Нобелівський лауреат з фізики, іноземний член НАН України П'єр-Жіль де Жен. У вузькому значенні м'яку речовину іноді ототожнюють із складними рідинами, у яких присутні частинки або ж структури мезоскопічних розмірів (полімери, поліелектроліти, рідкі кристали, колоїдні та міцелярні системи, піни, мікроемulsії). До м'якої речовини відносять також гелі, мембрани, аморфні, сипучі, гранулярні та склоподібні матеріали, пористі середовища тощо. Загалом м'яка речовина охоплює майже всі матеріали повсякденного життя (продукти харчування, косметичні засоби, дерево та гума, пластмаси та паперові вироби, тканини тощо), а також об'єкти фізики живого.

вимагає розвитку адекватного теоретичного апарату для досліджень. Саме ці задачі і визначили основне наукове кредо в науковій роботі І.Р. Юхновського.

Серед основного доробку Юхновського у статистичній фізиці слід, насамперед, виділити низку оригінальних методів, що були ним запропоновані та дозволили досягти суттєвого прогресу у розвитку теорії багатьох фізичних об'єктів. У цій короткій статті ми зупинимося на аналізі лише деяких з них, а саме: методиці знаходження рівнянь Боголюбова у довільному порядку за плазмовим параметром; методі колективних змінних і розвитку функціональних підходів у статистичній фізиці; методі врахування короткосяжних взаємодій у теорії багатьох частинок (метод системи відліку); мікроскопічній теорії фазових переходів, що базується на методі наближеного перетворення ренормалізаційної групи.

3. ПОЧАТКИ: РІВНЯННЯ БОГОЛЮБОВА І РОЗВИНЕННЯ ЗА ПЛАЗМОВИМ ПАРАМЕТРОМ

Уже в першій своїй відомій монографії “Проблемы динамической теории в статистической физике” (1946) М.М. Боголюбов окреслив одну із чільних задач, що потребувала свого розв'язку: “Остается открытой проблема построения разложений, с помощью которых можно было-бы исследовать системы с взаимодействием, включающим и кулоновские и короткодействующие силы, и которые бы позволяли получать асимптотические формулы не только первого приближения”.

Слід зауважити, що на той час Микола Миколайович фактично сформулював математичний апарат, що дозволяв на практиці вивести вирази для функцій розподілу для газів (розклад за густиною) та багаточастинкових систем заряджених частинок (розклад за плазмовим параметром), а отже вийти на вирази для термодинамічних характеристик, і привів ці вирази у перших порядках теорії. Ще будучи студентом, Ігор Рафаїлович поставив своїм завданням узагальнення цих результатів та розвиток послідовної методики, яка б дозволяла отримати відповідь у довільному порядку такої теорії збурень. Саме ця задача і лягла в основу його кандидатської дисертації. Проблема суттєво ускладнювалася тим, що в реальних моделях електролітів завжди існує конкуренція коротко- і далекосяжних взаємодій і кожний із різновидів взаємодії відповідає за формування тих чи інших макроскопічних властивостей системи. Якщо без врахування короткодії практично неможливо коректно описати структурні властивості чи отримати адекватне рівняння стану, то далекодія кулоніського типу є повністю відповідальною за електрофізичні властивості і може суттєво впливати на теплові ефекти. Завдання ускладнювалося ще й тим, що кожний із різновидів взаємодії міг виступати в якості формально малих поправок лише у своїй характерній області просторових масштабів.

У своїй кандидатській дисертації І.Р. Юхновський запропонував елегантний метод діаграмної теорії збурень, яка дозволяла розраховувати частинкові функції розподілу у довільному порядку за плазмовим параметром, а також показав як така діаграмна теорія може бути узагальнена на випадок конкуруючих коротко- і далекосяжних

взаємодій. І хоча розрахунки на практиці виконувалися для модельного далекосяжного потенціалу типу Морзе, вони дозволили вже в ті часи отримати результати, які значно пізніше були відтворені іншими методами для систем із суттєвою короткодією. Оскільки ця проблема детально висвітлена у книжці [8], то не будемо тут зупинятися на її обговоренні. Обмежимося лише згадкою про те, що очевидно саме у кандидатській дисертації І.Р. Юхновського вперше математично строго було запропоновано процедуру отримання виразів у довільному порядку за плазмовим параметром, отримано відповідні вирази і показано у який спосіб результати теорії можуть модифікуватися при врахуванні короткосяжних взаємодій. Ці результати дозволили по новому переосмислити постановку задачі про теорію багаточастинкових систем класичних заряджених частинок і лягли в основу досліджень цілої групи учнів Ігора Рафаїловича. У 1982 році у видавництві “Наукова думка” побачила світ монографія М.Ф. Головка та І.Р. Юхновського [9], у якій представлено основи рівноважної теорії таких систем, а також теорії простих і молекулярних рідин та систем, у яких окрім кулонівських взаємодій суттєву роль можуть відігравати дипольні, квадрупольні чи вищої порядку взаємодії. У цій же монографії обговорюються питання про конкуруючі взаємодії і запропоновано кілька методів для їх адекватного опису. До обговорення деяких із цих оригінальних методів та підходів ми ще повернемося у наступних розділах.

4. МЕТОД КОЛЕКТИВНИХ ЗМІННИХ

Типовою для більшості об'єктів м'якої речовини є їх структурна складність. Як правило це системи структурно-непорядковані, у яких, водночас, спостерігається ближній порядок. Саме існування ближнього порядку визначає низку специфічних властивостей м'якої речовини, зокрема такі особливості структури зумовлюють важливу роль у них колективних ефектів, що проявляються як в динаміці, так і на рівні рівноважної поведінки. Усе це спричиняє суттєві труднощі при побудові послідовної теорії та вимагає розробки низки принципово нових методів для коректного врахування ефектів структурної складності систем із ближнім порядком.

Опис колективних ефектів у структурно-непорядкованих системах став предметом активних досліджень уже в 50-х роках. В цьому напрямі працювало чимало відомих фізиків-теоретиків, які намагалися математично строго ввести в теорію концепцію колективних координат. Одним із успішних підходів, що базувався на рівняннях мікроскопічної динаміки і широко використовувався згодом в задачах фізики ядра, став метод, який розвивався Бомом і Пайнсом [10]. Водночас для вивчення рівноважних властивостей багаточастинкових систем більш придатними виявилися підходи, що ґрунтувалися на методах функціонального аналізу. Зокрема, наприкінці 50-х незалежно один від одного Стратонович та Габбард запропонували [11] метод переходу від стандартного представлення статистичної суми на мові фазових змінних до функціонального її представлення. Метод базується

на простій інтегральній тотожності

$$e^{\frac{1}{2}\hat{\rho}w\hat{\rho}} = C \int (d\phi) e^{-\frac{1}{2}\phi w^{-1}\phi} \exp\{\phi\hat{\rho}\}. \quad (1)$$

Нині в науковій літературі цей метод досить широко застосовується у теорії багаточастинкових систем і відомий як метод перетворення Стратоновича-Габбарда. Практично в той же час у роботах Юхновського було сформульовано принципово інший підхід [12] – метод колективних змінних, який є більш загальним і гнучким. З формальної точки зору, цей підхід базується на іншій функціональній інтегральній тотожності, що використовує узагальнені функції Дірака, а саме:

$$e^{F[\hat{\rho}]} = \int (d\rho) \delta(\rho - \hat{\rho}) e^{F[\rho]} = C' \int (d\rho) e^{F[\rho]} \int (d\phi) e^{i\phi\rho} \exp\{-i\phi\hat{\rho}\}. \quad (2)$$

Уже з простого порівняння співвідношень (1) та (2) зрозуміло, що формулювання (2) є більш загальним, воно, як неважко показати [13], містить представлення (1) як частковий випадок парних взаємодій у показнику експоненти, а для більш складних типів взаємодій перетворення (1) не може бути використане в принципі. В роботах Юхновського було строго показано як можна використати співвідношення (2) для опису багаточастинкових систем заряджених частинок, рідин та плинів, отримано відповідні функціональні представлення для статистичної суми і проведено розрахунки основних структурних та термодинамічних характеристик у наближенні хаотичних фаз, а також із застосуванням послідовних наближень за оберненим радіусом ефективної взаємодії.

Таким чином, для опису рівноважних властивостей структурно-непорядкованих неперервних та ґраткових систем взаємодіючих частинок в роботах І.Р. Юхновського було запропоновано метод колективних змінних, що відкрив широкі можливості для використання функціональних підходів у теорії конденсованої речовини. Згодом цей метод було узагальнено на випадок багатокомпонентних сумішей і квантових систем, а також систем із замороженим безладом. Особливо переконливо переваги методу колективних змінних проявилися при мікроскопічному описі критичних явищ і дослідженні фазової поведінки, про що буде сказано далі.

Тут слід також відзначити, що переваги методу колективних змінних перед підходами, які базуються на використанні інтегральної тотожності (1), чітко проявляються і тоді, коли є потреба встановити тісніший взаємозв'язок із теорією функціоналу густини. Так, якщо у виразі (2) провести інтегрування (чи “шпурування” у квантовому випадку) за мікроскопічними ступенями вільності системи, то проміжні змінні $\{\phi\}$ можна виключити, розрахувавши відповідний інтеграл методом перевалу. У випадку, коли колективні ефекти враховуються на фоні флюктуацій в ідеальній системі (без включення короткосяжної взаємодії у базисну систему відліку), таке інтегрування виконується точно в термодинамічній границі і в таких спосіб приходимо до функціонального інтегралу лише за набором змінних $\{\rho\}$, що описує флюктуаційні ефекти уже в повній багаточастинковій системі на мові

відповідних колективних змінних. Якщо для прикладу використати такий підхід у випадку моделі Ізинга, то легко прийти до виразу для статистичної суми у формі:

$$Z(T, H) = C \int (dm) \exp \left[\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \beta \Phi(k) m_{\mathbf{k}} m_{-\mathbf{k}} + \sum_i h m_i - F_{\text{id}}[\{m_i\}] \right], \quad (3)$$

де

$$F_{\text{id}}[\{m_i\}] = \sum_i \left\{ \frac{1}{2} (1 + m_i) \ln(1 + m_i) + \frac{1}{2} (1 - m_i) \ln(1 - m_i) \right\}$$

— густина вільної енергії ідеальної системи ізингівських спінів при відсутності поля. Представлення статистичної суми у вигляді (3) добре відоме в теорії функціоналу густини. Інтегруючи за змінними $\{m_i\}$ з використанням методу перевалу, легко виконати розрахунки і отримати результати в наближенні середнього поля. Врахування гаусівських флуктуаційних поправок приведе до виразів у наближенні хаотичних фаз. При цьому важливо зауважити, що підхід, використаний при одержанні представлення (3), має значно ширшу область застосування. Особливо цікаві перспективи тут залишаються для систем, у яких система відліку є неідеальною. Так було б цікаво, для прикладу, розглянути модельний плин із твердокульковою системою відліку та порівняти отримані результати із відомими виразами, що широко застосовуються у теорії функціоналу густини. Усе це дає змогу стверджувати, що потенціал методу колективних змінних, який в ідейному плані був сформульований І.Р. Юхновським наприкінці 50-х років, ще далеко не вичерпаний і має хороші перспективи подальших застосувань.

Ідея виділення колективних змінних при дослідженні фізичних процесів виявилася доволі продуктивною і при дослідженні нерівноважних властивостей конденсованих систем. Саме з її використанням у 90-х роках було розвинуто [14] метод узагальнених колективних мод, який дав змогу отримати строге формулювання узагальненої гідродинаміки на мові колективних мод для густих плинів, сумішей, магнітних та полярних рідин і розв'язати цілу низку фундаментальних проблем нерівноважної статистичної фізики багаточастинкових систем.

5. КОРОТКОСЯЖНІ ВЗАЄМОДІЇ І МЕТОД СИСТЕМИ ВІДЛІКУ У ТЕОРІЇ БАГАТОЧАСТИНКОВИХ СИСТЕМ

Спільною особливістю ефективних потенціалів взаємодії між частинками м'якої речовини на різних рівнях деталізації є наявність у них короткосяжних відштовхувальних взаємодій, що враховують ефекти виключеного об'єму і визначають форму частинок, далекосяжних взаємодій електростатичного походження і взаємодій на проміжних відстанях (ван-дер-ваальсівські взаємодії, взаємодії, що формують водневі зв'язки, а також описують ентропійні та стеричні ефекти, тощо). Кожна з цих складових важлива на своїх масштабах і визначає певну групу своїх властивостей. Проблема рівноправного врахування усіх взаємодій – одна із центральних у статистичній фізиці і

суттєвим кроком на шляху її розв'язання став метод системи відліку, що передбачає розвиток різних варіантів теорії збурень за далекосяжними взаємодіями на фоні точного (квазіточного) розв'язку задачі для системи із короткодією (системи відліку). В роботах І.Р. Юхновського було запропоновано два різні підходи до врахування конкуруючих коротко- (SR – short-range) та далекосяжних (LR – long-range) взаємодій. Перший з них базувався на варіаційному підході, що дав змогу у застосуваннях до систем заряджених частинок отримати модифіковані віріальні розклади, у яких враховувалися далекосяжні кулонівські взаємодії. Інший підхід ґрунтувався на модифікації методу колективних змінних, коли короткосяжні взаємодії враховувалися як система відліку через узагальнення представлення (2) у формі

$$e^{-\beta H_{\text{LR}}[\hat{\rho}]} e^{-\beta H_{\text{SR}}} = \int (d\rho) e^{-\beta H_{\text{LR}}[\rho]} \left[\delta(\rho - \hat{\rho}) e^{-\beta H_{\text{SR}}} \right]. \quad (4)$$

При обчисленні статистичної суми на основі виразу (4) бачимо, що від мікроскопічних фазових змінних залежить лише та частина у правій його стороні, яка є у квадратних дужках. А отже, використавши інтегральне представлення для δ -функції, прийдемо до необхідності знаходження твірного функціоналу для системи відліку, що означає лише з короткосяжними взаємодіями. У такий спосіб отримується функціональне представлення для багаточастинкової системи в цілому, яке враховує уже всі типи взаємодій.

Використання ідей системи відліку дозволило отримати низку оригінальних результатів як для неперервних класичних та квантових систем, так і для багатьох ґраткових моделей, зокрема із численними застосуваннями в теоріях сегнетоелектриків та феромагнетизму.

У цьому ж контексті доцільно також згадати і більш пізні застосування ідей системи відліку, що були ініційовані Юхновським у 80-х роках і стосуються використання методів комп'ютерного моделювання у фізиці конденсованої речовини. У випадку, коли важливу роль відіграють саме далекосяжні взаємодії, які важко враховувати в комп'ютерному експерименті через скінченність симуляційної комірки, то їх можна враховувати теоретично на фоні даних комп'ютерного моделювання. Так використання як системи відліку результатів комп'ютерного моделювання дало змогу [15], зокрема, коректно описати діелектричні та термодинамічні властивості води.

6. ТЕОРІЯ ФАЗОВИХ ПЕРЕХОДІВ: ЗАГАЛЬНИЙ ПІДХІД І ЙОГО ЗАСТОСУВАННЯ

Наприкінці 50-х – початку 70-х років однією із найактуальніших проблем теоретичної фізики вважалася задача опису особливостей критичної поведінки поблизу фазових переходів другого роду та формування при цьому певних універсальних властивостей у цілком різних фізичних об'єктах. При наближенні до точки переходу в системі сильно зростає кореляційна довжина ξ , таким чином, навіть системи із короткосяжними взаємодіями стають ефективно далекосяжними. Така специфічна критична поведінка не може бути коректно описана в рамках звичних підходів типу середнього поля, оскільки в своїй основі

такі підходи є ефективно одночастинковими. Тому для врахування багаточастинкових кореляцій необхідно було розвивати принципово інші підходи та методи. Саме до цієї проблеми звернувся І.Р. Юхновський на початку 70-х.

Для того, щоб оцінити внесок Юхновського у розвиток теорії фазових переходів, скористаємося з окремих витягів із всесвітньо відомого курсу теоретичної фізики Ландау, зокрема із тому V [16], що побачив світ у 1976 році, тобто уже після смерті Лева Давидовича. У параграфі 147, що має назву “Эффективный гамильтониан”, приводиться загальна постановка статистичної задачі про дослідження фазового переходу другого роду, яка, як вказано там же ж у примітці, була висловлена Л.Д. Ландау у 1958 році.

Стартовою точкою такого дослідження пропонується розглядати функціонал термодинамічного потенціалу, означений наступним чином (вираз (147.4) у [16]):

$$\Omega[\eta(\mathbf{r})] = -T \ln \sum_N e^{\mu N/T} \int \exp \left\{ -\frac{E_N(p, q)}{T} \right\} \times \prod_{\mathbf{k}} \delta(\eta'_{\mathbf{k}} - \eta'_{\mathbf{k}}(p, q; N)) \delta(\eta''_{\mathbf{k}} - \eta''_{\mathbf{k}}(p, q; N)) d\Gamma_N. \quad (5)$$

Тоді власне для термодинамічного потенціалу маємо

$$\Omega = -T \ln \int \exp \left\{ -\frac{\Omega[\eta(\mathbf{r})]}{T} \right\} \prod_{\mathbf{k}} d\eta'_{\mathbf{k}} d\eta''_{\mathbf{k}}. \quad (6)$$

І далі говориться таке (с.522): “Интеграл (6) берется по бесконечному множеству переменных $\eta_{\mathbf{k}}$ (после того, как эффективный гамильтониан подстановкой $\eta(\mathbf{r})$ из (5) выражен через эти переменные). Если бы этот (как говорят *континуальный*) интеграл мог быть вычислен, тем самым был бы выяснен характер особенности функции $\Omega(\mu, T)$ вблизи точки перехода. **Это, однако, оказывается невозможным.**”

Зауважимо однак, що вираз (5) за своєю структурою цілком нагадує вирази (2) та (4), які лягли в основу методу колективних змінних, який був сформульований в роботах І.Р. Юхновського наприкінці 50-х. Як згадувалося вище, цей метод дає змогу провести розрахунок відповідних функціоналів (чи іншими словами ефективних гамільтоніанів) для випадку тієї чи іншої багаточастинкової системи. Саме слідуючи такому алгоритму, наприкінці 70-х років Юхновський приступив до дослідження феромагнітного фазового переходу на прикладі тримірної моделі Ізинга. На першому етапі ним було отримано функціональне представлення для статистичної суми моделі у формі

$$Z = C \int (d\rho) \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} d_2(k) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \frac{a_4}{4!N} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_4} - \dots \right\}, \quad (7)$$

яку можна тепер порівняти з виразом (6). Таким чином було пройдено етап, який вважався найважчим до реалізації. Проте при цьому

виникло набагато важче завдання – розвинути метод, в рамках якого можна було б виявити фізичний механізм формування універсальної поведінки при фазовому переході другого роду. На той час з робіт Каданова, Вілсона³ та інших дослідників було уже зрозуміло, в якому напрямку слід рухатися. Ідея зводилася до необхідності послідовного відінтегровування (поетапного виключення) колективних змінних, які описують кореляції на близьких відстанях. Юхновському вдалося сформулювати наближену схему такого поетапного інтегрування, що не використовувала теорії збурень за гаусовими флюктуаціями, тобто мала *непертурбативний* характер. Якщо припустити, що в інтервалі значень хвильового вектора $k \in [\Lambda/s, \Lambda]$, де Λ – максимальне значення хвильового вектора, який у ґраткових системах є обмежений першою зоною Бріллюена, можна скористатися усередненим значенням параметра $d_2(k)$, то інтегрування за короткохвильовими змінними можна виконати. І.Р. Юхновський показав як поетапно провести інтегрування [17] і отримав вираз, подібний до (7), але означений для змінних ρ_k із $k \in [0, \Lambda/s]$ та з новими (перенормованими) коефіцієнтами $d_2''(k)$ і a_4' . Далі такий процес можна знову продовжити і отримати коефіцієнти $d_2''(k)$ і a_4'' і т.д. Було проведено детальне дослідження еволюції цих коефіцієнтів при поетапному відінтегровуванні короткохвильових змінних у залежності від температури і показано, що в критичній точці реалізується спеціальний тип розв'язку, що відображає виникнення реномгурової симетрії при фазовому переході другого роду. Цей ключовий результат дав змогу отримати уже аналітичні розв'язки для зміни $d_2(k)$ і a_4 в процесі поетапного інтегрування поблизу критичної точки і розрахувати як універсальні, так і неуніверсальні величини для моделі Ізинґа. Що більш важливо, такий метод, будучи доволі загальним [18], дав змогу згодом учням І.Р. Юхновського дослідити специфічні властивості фазових переходів для багатьох інших моделей багаточастинкових систем – починаючи від складніших ґраткових спінових моделей і до переходів у неперервних системах, таких як багатокомпонентні суміші та іонні рідини. Зауважимо тут, що перші роботи І.Р. Юхновського з теорії фазових переходів побачили світ у середині 70-х років, тобто ще до публікації тому V [16] знаменитого курсу Л.Д.Ландау.

7. ПІДСУМКИ

І на завершення хочеться сказати ще кілька слів про головний підсумок діяльності Ігора Рафаїловича як фізика-теоретика. Як на мене, основним результатом його невтомної праці стало створення у Львові Інституту фізики конденсованих систем НАН України, де працює нині більшість з його учнів та послідовників. Львівська школа статистичної фізики сформувалася під впливом ідей Юхновського, завдячуючи його наполегливій праці і вмінню підтримати інтерес до пізнання незнаного в явищах природи. Представники цієї школи мають нині міжнародний авторитет і працюють у багатьох наукових центрах світу. Багато з них продовжили свою працю у вищих навчальних закладах

³Кеннета Вілсона було нагороджено Нобелівською премією з фізики у 1982 р. “за теорію критичних явищ, пов'язаних із фазовими переходами”.

і, на моє глибоке переконання, вони, як і зрештою кожний, хто пройшов школу Юхновського, на практиці чітко слідує тій методиці, яка тут наполегливо культивувалася: спершу слід добре зрозуміти задачу і проаналізувати перспективні шляхи її розв'язання, потім необхідно розчленувати складну задачу на менші, спланувати роботу і починати поетапно втілювати план у життя. І головне у цій методиці – багато, наполегливо і вперто працювати, не шукати легких шляхів і чітко бачити цілі. Тоді буде і результат і, водночас, величезне задоволення від його досягнення. Як інколи любить повторювати Ігор Рафаїлович, порівнятися із цим задоволенням творення може лише почуття до жінки, радість вперше тримати свою дитину на руках, емоційне натхнення у мистецтві. Такою є наука досягнення мети від Юхновського. Вона дає конкретні плоди, хоча не всі можуть скористатися з неї вповні, бо легко вона формулюється, але нелегко їй слідувати. І хочеться вірити, що попри усі проблеми і негаразди економічного плану студентська молодь не втратить інтерес до пізнання та творення і що є гарне майбутнє в українській науці.

ЛІТЕРАТУРА

- [1] Ігор Рафаїлович Юхновський. Бібліографія вчених України. – К.: Наукова думка, 1995. – 83 с.
- [2] Формули життя і творчості академіка Юхновського. Есе, інтерв'ю, хроніка. – Львів-Київ, 2000. – 160 с.
- [3] Юхновський І.Р. Вибрані праці. Фізика. – Львів: Видавництво Національного університету “Львівська політехніка”, 2005. – 858 с.
- [4] Юхновський І.Р. Вибрані праці. Економіка. – Львів: Видавництво Національного університету “Львівська політехніка”, 2005. – 864 с.
- [5] Юхновський І.Р. Вибрані праці. Політика. – Львів: Видавництво Національного університету “Львівська політехніка”, 2010. – 566 с.
- [6] Юхновский И.Р. Бинарная функция распределения для систем взаимодействующих заряженных частиц. – Дис. канд. фіз.-мат. наук. – Львів, 1954. – 112 с.
- [7] Мриглод І., Ігнатюк В., Головач Ю. Микола Боголюбов і Україна. – Львів: Євросвіт, 2009. – 192 с.
- [8] Юхновський І.Р. Бінарна функція розподілу для системи взаємодіючих заряджених частинок (За матеріалами кандидатської дисертації І.Р. Юхновського). – Львів: Євросвіт, 2010.– с. 8-14.
- [9] Юхновский И.Р., Головкин М.Ф. Статистическая теория классических равновесных систем. – Київ: Наук. думка. – 1980. – 372 с.

- [10] Bohm D. Generalized theory of collective coordinates.– Willey,1959; Bohm D., Pines D. A collective description of electron interactions. I. Magnetic interactions // Phys. Rev. – 1951.– bf 82. – 625–634.
- [11] Stratonovich R.L. On a method of calculating quantum distribution functions // Sov. Phys. Dokl.– 1958, 2.– p.416; Hubbard J. Calculation of partition functions // Phys. Rev. Lett.– 1959, 3.– 77–78.
- [12] Юхновский И.Р. Бинарная функция распределения для систем взаимодействия заряженных частиц// ЖЭТФ. – 1954, **27**. – 690.
- [13] Caillol J.-M., Patsahan O., Mryglod I. The collective variables representation of simple fluids from the point of view of statistical field theory. – Condens. Matter Phys. – 2005. – **8**, № 4(44). – 665–684.
- [14] Mryglod I.M., Omelyan I.P., Tokarchuk M.V. Generalized collective modes for the Lennard-Jones fluid // Mol. Phys. – 1995, **84**, No. 2. – 235-259; Mryglod I.M. Generalized statistical hydrodynamics of fluids: Approach of generalized collective modes // Condens. Matter Phys. – 1998. – **1**, No. 4(16). 753–796.
- [15] Trokhymchuk A.D., Holovko M.F., Heinzinger K. Static dielectric-properties of a flexible water model // J. Chem. Phys. – 1993. – **99**, No. 4. – 2964-2971.
- [16] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика, том V, часть 1. – Москва, 1976. – 584 с.
- [17] Юхновский И.Р. Интегрирование статистической суммы трехмерной модели Изинга в методе коллективных переменных // Укр. физ. журн.– 1977. **22** 325; 483.
- [18] Юхновский И.Р. Фазовые переходы второго рода. Метод коллективных переменных. Київ: Наук. Думка. – 1985, 252 с. [Yukhnovskii I.R. Phase Transitions of the Second Order. Collective Variables Method. Singapore: World Scientific. – 1987, 327 p.]

**DEVELOPMENT OF THE METHODS
OF STATISTICAL PHYSICS
IN THE WORKS OF ACADEMICIAN YUKHNOVSKII**

Ihor MRYGLOD

Institute for Condensed Matter Physics
76011 Lviv, Svientsitskoho str. 1
e-mail: mryglod@icmp.lviv.ua

This paper is dedicated to the 85th birthday of academician Yukhnovskii and has the goal to present a brief analysis of the main methods developed by him in the field of statistical many-particle physics. The emphasis is made on the following: original approach developed for solving the Bogolyubov's equations in the form of plasma parameter expansions, new possibilities opened up by the collective variables method, concept of reference system in many-particle theories, and nonperturbative version of phase transition theory.