Т. 65, № 1 ФИЗИКА 2022

УДК 539.672 DOI: 10.17223/00213411/65/1/56

## ПРИРОДА ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ. (РОЛЬ САМОСОГЛАСОВАННОЙ ОБРАТНОЙ СВЯЗИ В ЭВОЛЮЦИИ МАТЕРИАЛЬНЫХ СТРУКТУР)

## А.Г. Годизов

г. Обнинск, Россия

Одной из застарелых проблем статистической механики является ее неспособность определять границы фазовых областей конденсированных сред, вычислять термодинамические координаты фазовых переходов, предсказывать атомно-молекулярные структуры фаз по обе стороны от точки фазового перехода, а также скорость перехода от неравновесного состояния к состоянию термодинамического равновесия, зависимость структуры твердых тел от скорости охлаждения расплава и еще много всяких неспособностей. Все эти неприятности связаны с фундаментальной задачей объединения законов, действующих в микромире, с законами макроскопическими. Бесспорно, что и те и другие законы описывают одно и то же — материальные системы многих взаимодействующих частиц. Поэтому должен существовать общий закон, который связывает оба уровня описания материи в одно целое. Сама по себе механика не содержит в себе коллективных свойств системы частиц, но, по логике вещей, признаки этих свойств должны присутствовать в законах, управляющих микроскопическим поведением элементов системы. На такое объединение претендует принцип самосогласованной обратной связи, не нарушая принципы, положенные в основу статистической механики.

Ключевые слова: фазовые переходы, метастабильность, эмерджентность, обратная связь.

Нельзя поумнеть только от вычисления интегралов.

Дж. Уленбек

На свете есть столь серьезные вещи, что говорить о них можно только шутя.

Н. Бор

Современная парадигма статистической механики заключается в том, что при известных потенциалах взаимодействия «бесструктурных» точечных частиц (атомы и молекулы) можно вычислить статистическую сумму или статистический интеграл, которые связаны с термодинамическими потенциалами. Вершиной статистической теории являются распределение Гиббса [1] и теория корреляционных функций. В статистической сумме должна была бы содержаться вся термодинамическая информация о системе, в том числе и о фазовых переходах, и о метастабильных состояниях. Однако это не так – статистическая сумма Гиббса является однозначной и аналитической функцией температуры при всех ее значениях кроме нуля для систем с конечным числом частиц. То есть каноническое распределение Гиббса описывает только однофазные системы. Поэтому важно выяснить причины, по которым в статистической сумме Гиббса нет информации ни о фазовых переходах, ни о метастабильных состояниях. Предполагается также, что любая макроскопическая информация о системе многих частиц, при знании энергий взаимодействия этих частиц, может быть получена из распределения Гиббса или системы корреляционных функций. Эта информация должна была бы позволять строить и рассчитывать фазовые диаграммы и макроскопические характеристики системы частиц в зависимости от плотности и температуры. Но при фиксированной для всех фаз форме потенциалов взаимодействия частиц эта парадигма не позволяет рассчитывать термодинамические координаты фазовых переходов и объяснить различие структур системы частиц по обе стороны от точки фазового перехода. Не позволяет также объяснить зависимость структур твердого тела от скорости охлаждения расплава, причины существования переохлажденных жидкостей и отсутствие перегретых кристаллических фаз. Для неравновесной же системы, оставаясь в рамках парадигмы статистической механики, невозможно определить скорость приближения системы к равновесию и механизм этого процесса [2]. Поэтому соображения, направленные на достижение более адекватного представления о связи микроскопических законов с законами макроскопическими, являются актуальными.

В современной физике существует множество нерешенных проблем, без решения которых дальнейшее продвижение в познании окружающего нас мира затруднено [3]. Среди них отметим

## Уважаемые читатели!

Доступ к полнотекстовой версии журнала «Известия высших учебных заведений. Физика» осуществляется на платформе Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU на платной основе:

https://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725