

Оценку величины M . п. можно получить, сравнивая результаты теоретич. расчётов с эксперим. данными. Для Fe ($T_c \approx 10^3$ K), напр., $\lambda \approx 5000$ и $H^* \approx 5 \cdot 10^8$ Э. Такие большие значения λ и H^* не могут быть объяснены электродинамич. взаимодействием носителей магн. моментов. Диполь-дипольное взаимодействие моментов даёт значение $H^* \sim 10^3$ Э, что соответствует $T_c \sim 10^{-1}$ K. Природа М. п. оставалась непонятной вплоть до создания квантовой механики. В. Гейзенберг (W. Heisenberg, 1928) предположил, что поле H^* связано с обменной частью эл.-статич. взаимодействия электронов, зависящей от взаимной ориентации их спинов S :

$$\mathcal{E}_{ij} = -2AS_iS_j, \quad (5)$$

где \mathcal{E}_{ij} — энергия взаимодействия, A — т. н. обменный интеграл. Существование такого взаимодействия является следствием антисимметрии волновых функций электронов, т. е., в конечном счёте, Паули принципа.

В приближении, учитывающем взаимодействие только ближайших Z соседей в кристаллич. решётке, усреднение по одному из спинов в (5) ($\bar{S} \sim M$) приводит к выражениям

$$\lambda = 2ZA/Ng^2\mu_B^2, \quad T_c = 2ZS(S+1)A/3, \quad (6)$$

что даёт правильный порядок величин λ и T_c при значениях $A \sim 10^{-13}$ эрг. В дальнейшем гипотеза Гейзенберга развивалась в большом кол-ве работ в рамках модели локализованных (на узлах решётки) спинов (см. Гейзенберга модель).

Учёт обменного взаимодействия в теории М. п. для коллективизиров. электронов в металлах был проведён Э. Стонером (E. C. Stoner, см. Стонера модель). Л. Неель (L. Néel, 1932) обобщил теорию М. п. на случай неск. магнитных подрешёток и рассмотрел термодинамич. свойства ферромагнетиков и антиферромагнетиков.

Несмотря на грубый характер лежащих в основе теории М. п. приближений, она даёт качественно правильную картину поведения магн. свойств в широком интервале темп-р. Так, вблизи T_c разложением в ряд по $x < 1$ ур-ния (2) можно получить (при $H = 0$) соотношение:

$$M(T)/M(0) = [3(1 - T/T_c)]^{1/2}, \quad (7)$$

к-рое следует также из теории фазовых переходов 2-го рода Ландау. Только сравнительно узкая область критических явлений лежит вне рамок теории М. п.

Для низких значений T ($x \gg 1$) теория М. п. даёт $M \approx M_0[1 - 2 \exp(T/2\theta)]$, что количественно не согласуется с более точным приближением спиновых волн $M \approx M_0(1 - \beta T^{3/2})$ (Блоха закон трёх вторых, где M_0 — макс. значение M при $T = 0$, β — постоянная для данного в-ва).

Более детальные исследования показывают, что применимость теории М. п. связана с характером взаимодействия между частицами — носителями магн. момента. Для взаимодействующих сил теория даёт более хорошие результаты. Так, в модели Гейзенберга поправки к результатам теории М. п. пропорциональны $1/n$, где n — число соседних частиц, взаимодействие с к-рыми ещё достаточно велико.

В совр. теории магнетизма существуют выходящие за рамки теории М. п. методы, позволяющие учитывать корреляцию между спинами. Эти методы привели к ряду новых результатов в термодинамике магн. свойств твёрдых тел. В частности, учёт флуктуаций даёт возможность получить одновременно как закон Кюри — Вейса, так и низкие (много меньше темп-ры Ферми) величины T_c для вырожденного газа электронов в ферромагн. металле, что вызывало существенные трудности в теории Стонера.

Несмотря на появление более точных (но соответственно более сложных) методик, теория М. п. продол-

жает оставаться одним из осн. методов расчёта магн. свойств систем взаимодействующих частиц.

Лит.: Т я б л и к о в С. В., Методы квантовой теории магнетизма, 2 изд., М., 1975; К и т т е л ь Ч., Введение в физику твёрдого тела, пер. с англ., М., 1978.

Ю. П. Иркин.

МОЛЕКУЛЯРНОЕ ТЕЧЕНИЕ (свободномолекулярное течение) — течение разреженного газа, состоящего из молекул, атомов, ионов или электронов, при к-ром свойства потока существенно зависят от беспорядочного движения частиц, в отличие от течений, где газ рассматривается как сплошная среда. М. т. имеет место при полёте тел в верх. слоях атмосферы, в вакуумных системах и др. При М. т. молекулы (или др. частицы) газа участвуют, с одной стороны, в поступат. движениях всего газа в целом, а с другой — движутся хаотически и независимо друг от друга. Причём в любом рассматриваемом объёме молекулы газа могут иметь самые различные скорости. Поэтому основной теоретич. рассмотрением М. т. является кинетическая теория газов. Макроскопич. свойства вязкого, сжимаемого, изэнтропич. течения удовлетворительно описываются простейшей моделью в виде упругих гладких шаров, к-рые подчиняются максвелловскому закону распределения скоростей (см. Максвелла распределение). Для описания вязкого, неизэнтропич. М. т. необходимо пользоваться более сложной моделью молекул и ф-цией распределения, к-рая несколько отличается от ф-ции распределения Максвелла. М. т. исследуются в динамике разреженных газов.

Лит.: П а т т е р с о н Г. Н., Молекулярное течение газов, пер. с англ., М., 1960; Аэродинамика разреженных газов, сб. 1, Л., 1963; К о г а н М. Н., Динамика разреженного газа, М., 1967.

МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ МЕТОД — собирательное название неск. численных методов решения разл. физ. задач при помощи моделирования (имитации) движения атомов, молекул, коллоидных и т. п. частиц, составляющих исследуемую систему. Обычно предполагают известными законы взаимодействия между частицами в рамках классич. механики. Численно интегрируя ур-ния механики, можно проследить за движением частиц и, усредняя по времени и по всем частицам, попытаться вывести микро- и макроскопич. характеристики изучаемой системы. При этом обычно исходят из предположения (поддающегося проверке при помощи М. д. м.), что рассматриваемая система является эргодической (см. Эргодичность). Реальные модели могут содержать не более неск. млн. частиц; но даже системы, состоящие из неск. десятков или сотен атомов или молекул, представляют интерес. Для описания макроскопич. тел или сред применяют ряд спец. приёмов и методов. М. д. м. особенно полезен при исследовании таких систем (жидкость, плотная плазма и т. д.), в к-рых ср. кинетич. энергия K сравнима с потенц. энергией U . При этом отсутствует малый параметр, позволяющий развить, напр., теорию твёрдых тел ($K/U \ll 1$) и газов ($U/K \ll 1$). В зависимости от размеров системы и времени наблюдения за её эволюцией, а также с точки зрения изучаемых вопросов (стационарные состояния и термодинамика, неравновесные процессы и физ. кинетика и т. п.) все разновидности М. д. м. представляют собой иерархич. структуру — от численных экспериментов динамич. типа до динамич. Монте-Карло метода. В отличие от метода Монте-Карло, разработанного для вычисления равновесных величин, М. д. м. позволяет описать приближение системы к состоянию равновесия. Впервые М. д. м. был использован в работах Б. Олдера (B. Alder) и Т. Вайнрайта (Th. Wainwright) в 1957, а также А. Рахмана (A. Rahman) в 1964.

Численное моделирование в М. д. м. С помощью адекватного метода вычислит. математики численно интегрируют ур-ния движения классич. механики для всех частиц системы при заданных потенциалах межчастичных взаимодействий, внеш. полях, связях, начальных и граничных условиях. В простейшем случае одно-