

01;05.1

© 1991

КВАНТОВО-СТАТИСТИЧЕСКИЙ ПОДХОД В СИНЕРГЕТИКЕ ДЕФОРМИРУЕМЫХ СРЕД

А.С. Баланкин

Традиционный подход к построению квантовой механики деформируемого твердого тела [1, 2] базируется на использовании парного межатомного потенциала $U(r)$, который независим от типа межатомных связей характеризуется: 1) существованием минимума $U(r_{ij})$, отвечающего равновесному межатомному расстоянию r_{ij} при $T = OK$, которое определяется конкуренцией сил притяжения и отталкивания; 2) существованием такого положения r_m , в котором сила межатомного взаимодействия $\sim (\partial U / \partial r)$ максимальна, т.е. $\left. \frac{\partial^2 U}{\partial r^2} \right|_{r_m} = 0$. Энергетический спектр такого потенциала представляет собой набор энергетических уровней ε_n , причем вследствие нулевых колебаний атом в основном состоянии имеет конечную энергию $\varepsilon_0 = \frac{\pi \hbar}{r_{ij}} \sqrt{\frac{U(r_{ij})}{m}}$, отсчитываемую от уровня $U(r_{ij}) = 0$ (здесь \hbar - постоянная Планка, а m - масса атома). Амплитуда нулевых колебаний, очевидно, равна $\langle \Delta r \rangle = r_{ij} m c_\alpha / \sqrt{m U(r_{ij})}$, где $c_\alpha = \frac{\pi \hbar}{m r_{ij}}$ - предельная скорость финитного движения атомов в потенциальной яме $U(r)$. В силу соотношения неопределенности, энергетические уровни атомов в парном потенциале имеют конечную ширину, причем $\delta \varepsilon_0 = \pi^2 \hbar^2 / 2 m r_{ij}$. Заметим, что $\delta \varepsilon_0$ равна кинетической энергии атома, для которого длина волны де-Бройля равна $\lambda_B = 2 r_{ij}$, что соответствует скорости движения атома $u = c_\alpha$. Вследствие несимметричности $U(r)$ снимается вырождение уровней возбуждения $n = 1, 2, \dots$, благодаря чему разность энергий между соседними уровнями $\Delta \varepsilon_n = \varepsilon_{n+1} - \varepsilon_n$ уменьшается с ростом n , причем каждому энергетическому уровню соответствует свое устойчивое относительное расположение атомов и свое $r_{ij}^{(n)}$ (обычно $r_{ij}^{(n+1)} > r_{ij}^{(n)}$). При таком рассмотрении состояние квантового кристалла [2], очевидно, реализуется при условии $\Delta \varepsilon_0 < \delta \varepsilon_0$.

В действительности же для состояний конденсированного вещества (кристаллического, аморфного, квазикристаллического, жидкого) характерна сильная корреляция относительного положения атомов на расстояниях $L_0 \gg r_{ij}^{(n)}$, что и обеспечивает сдвиговую жесткость конденсированных сред (в том числе локальную сдвиговую жесткость вязких жидкостей). Поэтому реологическое поведение реальных деформируемых сред определяется динамикой коллективных

возбуждений [3, 4]. Это и предопределило успешное использование идей и методов синергетики в механике деформируемых сред [3-5], что уже привело к становлению новой научной дисциплины — синергетике деформируемых сред (СДС) [6, 7].

Существуют различные подходы к построению синергетики деформируемых сред [4-7]. Ниже демонстрируется эффективность квантово-статистического подхода [4], позволяющего получить целый ряд фундаментальных результатов непосредственно из первых принципов.

Спектр структурных возбуждений (дефектов) в деформируемых конденсированных средах может быть корректно определен на основе решения нестационарных уравнений стохастической механики [9] с потенциалом $V_{ij}(\vec{r})$, формируемым ансамблем атомов, определяющим „структурную память“ деформируемой среды. Аналитическое решение уравнений стохастической механики в общем случае, очевидно, невозможно. Однако основные свойства коллективных возбуждений могут быть установлены, если потенциальный рельеф представить в форме $V_{ij}(\vec{r}) = V_{ij}^0 f(\vec{r})$, где $f(\vec{r})$ — периодическая функция, определенная на масштабах $\sim L_0$, а

$$V_{ij}^0 = \begin{cases} U(r), & |r_i - r_j| \leq \alpha_0 \\ V_0 |r_i - r_j|^{-\alpha}, & |r_i - r_j| > \alpha_0 \end{cases} \quad (1)$$

Здесь $U(r)$ — V -образный потенциал, определяющий взаимодействие внутри первой координационной сферы радиусом α_0 , который определяет объемную упругость среды, характеризуемую модулем B , а $V_0 |r_i - r_j|^{-\alpha}$ — учитывает дальнедействующие межатомные корреляции, обеспечивающие сдвиговую жесткость среды, характеризуемую модулем $G = \rho c_t^2$, где ρ — плотность среды, а c_t — скорость распространения поперечных акустических волн (в жидкостях $c_t = 2/L_0$, η — динамическая вязкость). Как следует из рассмотрения, проведенного в [9], $\alpha = 1 - 2\nu_3$ — эффективное локальное значение коэффициента поперечных деформаций. В этом случае легко показать следующее.

1. В элементах конденсированной среды объемом $\sim L_0^3$ с заметной вероятностью может реализоваться лишь весьма ограниченный набор атомных конфигураций.

2. Возбуждения могут быть как потенциального ($\text{rot } \vec{u} = 0$), так и соленоидального ($\text{div } \vec{u} = 0$) типа. Последние обуславливают существование ротационных мод деформаций, рассмотренных в [5].

3. Существует иерархия характерных пространственных масштабов коллективных возбуждений в деформируемой среде ($n = 0, 1, 2, \dots$):

$$\lambda_n = \frac{L_{n+1}}{L_n} = \frac{\text{rot rot } \vec{u}}{\text{grad div } \vec{u}} = \frac{2(1-\nu_3)}{1-2\nu_3}, \quad (2)$$

что, в частности, проявляется в самоорганизации структурных уровней деформации и разрушения твердого тела, не связанных с исходной структурой материала [5].

4. Пространственное распределение коллективных возбуждений в деформируемой среде самоподобно, причем фрактальная размерность поля коллективных возбуждений равна

$$d_f = 2(1 + \nu_3) \quad (3)$$

и находится в пределах $0 < d_f < 3$.

5. Времена релаксации импульса $\tau_p^{(n)}$ атомов ($n = 0$) и коллективных возбуждений n -го уровня много меньше времен релаксации энергии $\tau_\varepsilon^{(n)} \gg \tau_p^{(n)}$ ($\tau_p^{(0)} \sim \frac{\alpha_0}{c_t}$, $\tau_\varepsilon^{(0)} \sim \frac{L_0}{c_t}$; $\frac{L_0}{\alpha_0} \sim \sqrt{\frac{c_t}{c_\alpha}} \gg 1$).

Поэтому при неупругой деформации происходит кумуляция избыточной энергии в автолокализованных структурных возбуждениях.

6. Предельное значение потенциальной энергии упругих деформаций, которое может быть накоплено в автолокализованном возбуждении n -го уровня пропорционально $(L_n)^{D_f^{(n)}}$, где $D_f^{(n)} = 2(1 - \nu_3^{(n)}) / (1 - 2\nu_3^{(n)})$ - размерность коллективных возбуждений n -го уровня, определяемая эффективным "структурным" значением $\nu_3^{(n)}$. Легко видеть, что $D_f^{(n)} > 4/3$.

7. Интенсивность оттока энтропии из сильно неравновесных областей автолокализации избыточной энергии, контролирующая кинетику процессов самоорганизации диссипативных структур (ДС), определяется фрактальной размерностью поверхности сильно неравновесных областей $d_f^{(n)} = 2(1 + \nu_3^{(n)})$.

8. Согласно S -теореме [10] самоорганизация ДС в открытых системах сопровождается уменьшением энтропии и производства энтропии, нормированных на постоянное значение средней кинетической энергии. Для процессов самоорганизации ДС в деформируемой среде аналог S -теоремы может быть сформулирован в форме D -теоремы:

$$D_f^{(n)} > D_f^{(n+1)}, \quad d_f^{(n)} < d_f^{(n+1)}, \quad (4)$$

из которой, в частности, следует, что предположение *Sih* [11] об инвариантности предельной плотности энергии ($\varepsilon_m^{(n)}$) несправедливо, поскольку $\langle \varepsilon(n) \varepsilon(n') \rangle \sim r^{-\alpha_n}$.

9. Обобщенные уравнения переноса массы, импульса и энергии (в том числе тепловой) в деформируемой среде могут быть представлены в форме

$$\frac{\partial^{\beta} \vec{u}}{\partial t^{\beta}} = D_{\beta} \Delta \vec{u}, \quad (5)$$

где $\partial^{\beta} / \partial t^{\beta}$ - дробная производная по времени [12], а β определяется размерностью $d_f^{(n)}$.

$$\beta_n = 1 + 2\nu_3^{(n)}; \quad (6)$$

D_{ρ} - эффективный коэффициент диффузии (теплопроводности).

Использование дробных производных позволяет упростить математическую форму записи уравнений переноса в сильно неравновесных системах и дать им наглядную интерпретацию (ср. (5), например, с уравнениями, описывающими неизотермическую релаксацию в нелокальной среде [13], или фрактальную кинетику ползучести твердого тела [14], которые могут быть сведены к (5), (6) при переходе в пространство с дробной размерностью [4]).

Для уяснения физического смысла перехода в пространство с дробной размерностью, уравнение (5) удобнее переписать в интегральной форме

$$G(t) = \int_0^t K(t-\tau) u(\tau) d\tau, \quad (7)$$

где $K(t-\tau)$ - некоторая функция памяти (ядро релаксации, ядро ползучести [15] и т.п.).

В случае отсутствия памяти $K(t-\tau) = \delta(t-\tau)$ - дельта функция (марковские процессы): $\beta = 2$, т.е. поле переноса не самоподобно ($d_f \equiv d = 3$). При полной памяти $K(t-\tau)$ равно 1 при $\tau < t$ и 0 при $\tau > 0$: $\beta = 0$, что соответствует $d_f = 1$. В общем случае $K(t-\tau) \sim (t-\tau)^{\beta-1}$, т.е. фрактальная размерность полей переноса в деформируемых средах определяется „памятью“ среды. При этом инвариантом является произведение

$$\varepsilon_m^{(n)} D\beta_n = const, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (8)$$

где $\varepsilon_m^{(n)}$ - предельная плотность энергии (по *Sih* [11]), которая может быть накоплена в объеме $\sim L_n^3$.

Для процессов ползучести твердого тела, используя преобразование Лапласа-Карсона [13], легко получить выражение d_f в форме

$$d_f = \frac{6}{2+\omega}, \quad \omega = R^* \Pi^*, \quad (9)$$

где R^* и Π^* - изображения модулей релаксации и податливости, откуда следует выражение

$$1 < \beta = \frac{4-\omega}{2+\omega} \leq 3. \quad (10)$$

В заключение особо подчеркнем то обстоятельство (часто игнорируемое при построении эвристических моделей синергетики деформируемого твердого тела), что деформируемое тело в целом, по существу, является замкнутой системой (кроме некоторых специальных случаев), для которой справедливы соответствующие формулировки начал термодинамики, принципы Пригожина, Клаузиуса-Дю-

гема и т.п. Однако приближение сплошной однородной среды не выполняется, строго говоря, никогда, вследствие существования неоднородных флуктуаций плотности и сдвига даже в состоянии равновесия (в некоторых случаях этим можно пренебречь). В общем случае пространство, занимаемое деформируемой средой, не обладает свойством однородности со всеми вытекающими отсюда последствиями. В то же время для деформируемых сред должно выполняться свойство масштабной инвариантности. Именно масштабная инвариантность обеспечивает возможность микроскопических расчетов [4, 6] макропараметров деформируемых сред.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Черепанов Г.П. // Проблемы прочности. 1990. № 2. С. 3-9.
- [2] Косевич А.М. Физическая механика реальных кристаллов. Киев: Наукова думка. 1981. 328 с.
- [3] Баланкин А.С. // Письма в ЖТФ. 1988. Т. 14. В. 13. С. 1221-1226.
- [4] Баланкин А.С. // Письма в ЖТФ. 1989. Т. 15. В. 22. С. 15-20.
- [5] Панин В.Е., Лихачев В.А., Гриняев Ю.В. Структурные уровни деформации твердых тел. Новосибирск: Наука, 1985. 229 с.
- [6] Баланкин А.С. Синергетика деформируемого тела. М.: МО СССР. 1991. 358 с.
- [7] Тез. докл. П Всесоюз. симп. по перспективным металлическим материалам. М.: ИМЕТ АН СССР, 1991. 200 с.
- [8] Дмитриев В.П. // ДАН СССР. 1987. Т. 292. № 5. С. 1101-1105.
- [9] Баланкин А.С., Иванова В.С. // Письма в ЖТФ. 1991. Т. 17. В. 1. С. 32-35.
- [10] Климонтович Ю.Л. Турбулентное движение и структура хаоса. М.: Наука, 1990. 320 с.
- [11] S i n h G.S. // Naval Research Office of Naval Research Spring. 1980. V. XXXII, N 3. P. 30-42.
- [12] Самко С.Г., Килбис А.А., Маричев О.И. Интегралы и производные дробного порядка и некоторые их приложения. Минск: Наука и техника, 1987.
- [13] Уманцев А.Р., Ройбрут А.Л. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 4. С. 1124-1131.
- [14] Олемской А.И. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 11. С. 3384-3394.
- [15] Колтунов М.А. Ползучесть и релаксация. М.: Высшая школа, 1976. 96 с.

Поступило в Редакцию
30 мая 1991 г.