

01

Структурный переход и его закономерности

© Г.Е. Скворцов

С.-Петербургский государственный университет

Поступило в Редакцию 24 сентября 1997 г.

Рассматривается феномен структурного перехода, обобщающий явление фазового перехода и охватывающий структуры всех уровней и большую неравновесность. Указываются основные свойства, закономерности структурных переходов и обусловленные ими эффекты. Дается простая модель описания структурного перехода и в ее рамках рассматривается ряд неравновесных переходов.

В [1–4] были выявлены и обсуждены закономерности процессов сильной неравновесности. Данная работа посвящена применению этих законов к феномену структурного перехода (СП).

С использованием генетической связи СП и неустойчивости [3] устанавливаются основные свойства и закономерности перехода. Для анализа привлекаются присущие СП экстремальные закономерности, которые отличаются от равновесных. Предлагается простая эффективная модель, описывающая квазистационарные СП (от турбулизации до перехода к сверхпроводимости).

1. Структурный переход представляет собой макроскопически наблюдаемый процесс с существенным изменением, при котором объект — система $O_1[S_1]$, имеющая структуру S_1 , вследствие воздействия превращается в $O_2[S_2]$.

Множество СП включает в себя квазиравновесные фазовые переходы [5], дезинтеграционные многочастичные ядерно-атомные процессы, химические реакции, макроструктурные трансформации.

Структура объекта составляется из иерархической системы субструктур уровней $S = 1, 2, \dots$ и задается последовательностью наборов

$$\{\lambda_s, \tau_s, \varepsilon_s, n_s, m_s, \lambda_{s+1}, \tau_{s+1}, \varepsilon_{s+1}\}, \quad (1)$$

где первые три величины — пространственная, временная и энергетическая характеристики связей структурно-кинетических элементов —

флуктонов, уровня S , n_s — их численная плотность, последние четыре — параметры структурных элементов. Определения этих величин и соотношения между ними для уровней s и $s + 1$ даются в [4].

Большинство СП можно включить в систему с тремя уровнями: макроскопические флуктоны ($s = 1$), макромолекулярные глобулы (2) и атомно-молекулярные кластеры (3).

Энергетическая модель многоуровневой последовательности СП может быть представлена с учетом законов [2–4] посредством такого выражения степени неравновесности резонансного типа

$$\text{res} = \sum_{s=1} \left[1 + \left(\frac{\varepsilon_s}{\varepsilon_1} \right)^r \left(\frac{e - \varepsilon_s}{\varepsilon_1} \right)^{l_{\pm}} \right]^{-1}. \quad (2)$$

Здесь e — энергия воздействия на структурный элемент, степень l_{\pm} определяет ”аналитический вид” СП по энергии при подходе к ε_s справа и слева (гистерезис). В качестве ε_s можно взять рассматриваемый в [6] спектр $\varepsilon_s = sT_0$, $T_0 = 12.5$ К и описать большинство результатов [6], включая и ”дьявольскую лестницу” при подходящем выборе r и l_{\pm} .

Выражение (2) учитывает экстремальное свойство СП: $\max \text{res}$ при $e \simeq \varepsilon_s$ соответствует начальной стадии процесса перехода. Экстремальная зависимость по степени неравновесности обусловлена присущим СП пороговым процессам активации внутренних степеней. Заметим, что $\min \text{res}$ соответствует устойчивой структуре S_2 .

2. В [3] выявлена генетическая связь феномена СП и неустойчивости: структурному переходу сопутствует неустойчивость; в свою очередь, неустойчивость в системе с большим числом степеней, как правило, обусловлена СП.

Эта связь позволяет указать новые критерии СП, дать подходящую классификацию и осуществить динамический анализ СП.

Критериями СП, согласно указанной связи, являются все общие критерии неустойчивости [7]: скоростной, бифуркационный и балансовый.

Эти три типа критериев отражают разные стороны феномена СП. Скоростной критерий в форме квазистационарности отражает активационное замедление темпа в начальной стадии СП, а в форме резкого возрастания — указывает заключительную стадию разрушения исходной структуры. Бифуркационный критерий отражает возникновение ряда возможных результатов СП — ”креационное” свойство. Последнее обусловлено присущей неустойчивости большой реакции на малые

возмущения. Балансовый критерий указывает равенство действия системных связей и внешнего воздействия, которое предшествует СП.

В случае осуществления СП посредством управляемого воздействия, например, линейного по времени роста $g = g_0 t$, согласно соотношению

$$d_t \Phi(g(t)) = d_g \Phi(g) g_0, \quad (3)$$

бифуркационно-скачковые особенности определяющей величины $\Phi(g)$ совпадают с аномалиями при временном рассмотрении.

Балансовый критерий общего вида [7]

$$\partial_t A = g_+[A] - g_-[A], \quad g_+[A] = g_-[A] \quad (4)$$

в простейшей форме дает для СП ориентировочный критерий: равенство единице активной степени неравновесности [2,3].

Укажем, что надежными экспериментальными критериями СП служат особенности структурно-обусловленных величин, например, электромагнитных восприимчивостей, в виде изломов, пиков и скачков [6].

Заметим, что теория Ландау [8] с учетом выбора вида свободной энергии, по существу, является бифуркационной теорией (катастроф).

3. Известная классификация СП по признаку скачка, отражая некоторые сингулярности проявления СП, не учитывает существенные характеристики.

Дадим схему классификации СП согласно естественным признакам. В качестве наиболее подходящих возьмем такие признаки перехода $1 \rightarrow 2$:

$$S_1 \rightarrow S_2, \quad \Delta E = \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}{\varepsilon_1}, \quad \Delta \Pi = \frac{\Pi_2 - \Pi_1}{\Pi_1}, \quad H_{12} = \tau_{12} \left| \frac{\partial \bar{g}}{\partial t} \right|, \quad (5)$$

$s_{1,2}$ — первичные структурные характеристики, ΔE — энергетический эффект СП, $\Pi_{1,2}$ — значения структурно-обусловленных величин, τ_{12} — необходимое время перехода, H_{12} — скоростной параметр.

Относительно первого признака при трехуровневой структуре, очевидно, имеем девять вариантов СП. Относительно остальных трех признаков целесообразно выделить по три градации, которым соответствуют малые, умеренные и большие значений ΔE , $\Delta \Pi$, H_{12} .

К первому типу относятся квазиравновесные фазовые переходы, к последнему — взрывоподобные СП, сверхбыстрое сжатие твердых тел, образование элементов.

Полезно иметь в виду связь между типом СП и характеристикой сопутствующей ему неустойчивости: мягкий и жесткий режим для СП второго и первого рода, автоколебательный режим для СП второго типа, положительная обратная связь для СР взрывного типа и т.д.

4. Применение законов [2–4] и экстремальных закономерностей позволяет получить простое описание СП первого типа. По виду оно аналогично теории Ван-дер-Ваальса [8, с. 549], однако имеет фундаментальную основу и широкую область применимости.

Исходными служат представляющие интерес величины — потоки и силы, которые для СП первого типа являются функциями набора степеней неравновесности $\{g_m\}$ и имеют форму

$$\Phi_n(g) = \sum_m B_{nm}(g)g_m. \quad (6)$$

Определяющие соотношения (6) должны отражать законы границы качества, аномальности и чередования неравновесности.

В случае одного воздействия и параметра состояния p простая зависимость, удовлетворяющая этим законам и дающая приемлемую интерполяцию в области СП, имеет вид

$$\Phi(x, p) = a_1 \left(\frac{1}{3}x^3 - a_2x^2 + a_3x \right) + a_4 \equiv a_1B(x)x + a_4, \quad (7)$$

$$a_1 = \frac{6(\Phi_1 - \Phi_2)}{(x_2 - x_1)^3}, \quad a_2 = \frac{x_1 + x_2}{2} \equiv \bar{x}, \quad a_3 = x_1x_2, \quad a_4 = \Phi_1 - a_1B_1x_1.$$

Здесь $\Phi(x)$, $x = g/g_1$ — величины, нормированные относительно начальной границы СП: $\Phi(x_1 = 1) = 1$, $x_{1,2}$ — нули функции $\Phi'(x)$, x_2 — конечная граница СП.

Функция $\Phi(x)$ воспроизводит N -образную зависимость в области СП, которая, по существу, является универсальной: рост — нормальная реакция структуры S_1 ; $\max \Phi$ при x_1 — начало СП; убывание — аномальная реакция "смеси" — переход от S_1 к S_2 ; $\min \Phi$ при x_2 — конец СП; рост — нормальная реакция S_2 .

Область аномальности $\Phi' < 0$, $x_1 < x < x_2$, характеризуется развитием флуктуаций (неустойчивостью) до высшего уровня при $\Phi''(\bar{x}) = 0$.

Вопрос о скачкообразности изменения величин при СП в рамках принятой модели (7) выглядит следующим образом. Согласно (7)

величины $\Phi(g)$ в процессе перехода имеют наибольшую "резкость" $|\Phi'(\bar{x})| = 3(\Phi_1 - \Phi_2)/2(x_2 - x_1)$. Если она оказывается малой, то при использовании Φ как управляющего параметра скачок будут испытывать величины $g(\Phi)$: $\Delta g = g_1 - g_2$, $\Phi_{\min} < \Phi < \Phi_{\max}$.

Критической точке, очевидно, соответствует условие $g_1 = g_2$.

Предложенная модель СП применима для описания широкого круга явлений, а также последовательностей СП, если использовать аддитивную модификацию (см. (2)).

5. Рассмотрим описание ряда СП в рамках этой модели.

5.1. Режим кипения; данные [9, с. 158]. Определяющая величина — поток тепла

$$\bar{q}(\tau) = \frac{q(\tau)}{q_1}, \quad q_1 = q(\Delta_1 T), \quad \tau = \frac{\Delta T}{\Delta_1 T};$$

$$\Delta_1 T = 19 \text{ К}; \quad q_1 = 8.5 \cdot 10^5 \text{ W/m}^2, \quad \Delta_2 T = 280, \quad q_2 = 10^5.$$

Имеем, согласно (7),

$$a_1 = 0.00206, \quad a_2 = 7.85, \quad a_3 = 14.7, \quad a_4 = 0.985; \quad \bar{q}'(\bar{\tau}) = -0.097. \quad (8)$$

При условиях внедрения в метастабильную область ввиду малой резкости q будет иметь место (и наблюдается) скачок температуры.

5.2. Аномальная релаксация в ударных волнах (УВ); данные [10, с. 134, фиг. 19]. Определяющая величина — плотность за фронтом УВ

$$\rho(m) = \frac{\rho_2}{\rho_{c1}}, \quad m = \frac{M_s}{M_{s1}}; \quad M_{s1} = 10.8, \quad M_{s2} = 12.2;$$

$$p_1 = 0.01 \text{ mm}, \quad \rho_{c1} = 11.9, \quad \rho_{c2} = 11.4.$$

Имеем

$$a_4 = 114, \quad a_2 = 1.07, \quad a_3 = 1.13, \quad a_4 = -44.6; \quad \rho'(\bar{m}) = -0.6. \quad (9)$$

Этот переход, согласно физическому механизму АР [11], осуществляется от уровня 3 до уровня 1.

Используемая модель указывает скачок M_s , что соответствует наблюдаемому раздвоению УВ [11].

Следует отметить, что данные [12, с. 318, фиг. 19] демонстрируют наличие АР при $4.2 \div 5 \text{ km/s}$ для 1 атм., а также — более слабой особенности при скорости УВ 2 km/s .

Представляет интерес указание особенностей сильных УВ в конденсированных веществах [12, с. 311]; причиной их, следует полагать, является АР (см. [3]).

5.3. Турбулизация; данные [9, с. 21]. Определяющая величина — обратный коэффициент сопротивления

$$\xi(r) = \frac{\varphi_1}{\varphi}, \quad r = \frac{Re}{Re_1}; \quad Re_{1,2} = 2.5, 4 \cdot 10^4, \quad \varphi_{1,2} = 0.03, 0.04.$$

Имеем

$$a_1 = 6.94, \quad a_2 = 1.3, \quad a_3 = 1.6, \quad a_4 = -3.4; \quad \xi'(\bar{r}) = -0.6. \quad (10)$$

При увеличении напора в начале турбулизации должен быть скачок расхода.

Из множества имеющихся комментариев по работе ограничимся указанием, что рассмотренные примеры и другие данные свидетельствуют о реальности переходных, метастабильных, состояний (в модели Ван-дер-Ваальса они обычно изымаются, как нереализующиеся). Более того, используя их надлежащим образом, можно получить циклы второго рода преобразования энергии.

Список литературы

- [1] Скворцов Г.Е. // Письма в ЖТФ. 1990. Т. 16. В. 17. С. 15–18.
- [2] Скворцов Г.Е. // Письма в ЖТФ. 1997. Т. 23. В. 6. С. 85–89.
- [3] Скворцов Г.Е. // Письма в ЖТФ. 1997. Т. 23. В. 7. С. 23–27.
- [4] Скворцов Г.Е. // Письма в ЖТФ. 1997. Т. 23. В. 10. С. 17–21.
- [5] Гуфан Ю.М. Структурные фазовые переходы. М., 1982. 304 с.
- [6] Системы особых температурных точек твердых тел. Сб. М., 1986. 270 с.
- [7] Первозников Е.Н., Скворцов Г.Е. // ЖТФ. 1982. Т. 52. В. 12. С. 2353–2360.
- [8] Ландау Л.Д., Лившиц Е.М. Статистическая физика. Ч. 1. М., 1976. 584 с.
- [9] Кутателадзе С.С. Анализ подобия и физические модели. Новосибирск, 1986. 293 с.
- [10] Физика быстропротекающих процессов. Сб. Т. 3. М., 1971. 358 с.
- [11] Мишин Г.И., Бедин А.П., Юценкова Н.И., Скворцов Г.Е., Рязин А.П. // ЖТФ. 1981. Т. 51. В. 11. С. 2315–2324.
- [12] Физика быстропротекающих процессов. Сб. Т. 2. М., 1971. 352 с.