

Эволюция самоорганизующихся систем с точки зрения механики и термодинамики

© В.Г. Усыченко

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет,
195251 Санкт-Петербург, Россия
E-mail: Usychenko@rphf.spbstu.ru

(Поступило в Редакцию 6 декабря 2006 г.)

Распространение принципа наименьшего действия на системы, содержащие произвольное число частиц, показало, что естественное развитие процессов в природе определяется преимущественным преобразованием кинетической энергии в потенциальную энергию различных видов. Установлена связь с вариационными принципами неравновесной термодинамики. Показано, что процессами рождения и старения структур управляет принцип минимизации интегрального лагранжиана, роль которого в механике сопоставима с ролью второго закона в термодинамике.

PACS: 05.65.+b

Введение

Первый закон термодинамики — сохранения энергии — является всеобщим законом природы в отличие от второго закона, который существует только в термодинамике. Роль второго закона необычайно велика: он управляет эволюцией и развитием природы. На нем же базируются сформулированные Л. Онсагером, И. Пригожиным и П. Гленсдорфом принципы [1,2], управляющие самоорганизацией материи. Основываясь преимущественно на этих принципах, современная синергетика изучает механизмы образования структур в различных областях науки [3–8].

Второй закон предполагает наличие большого числа N частиц, представление о котором часто ассоциируется с числом Авогадро. Возникает вопрос: если уменьшать N , то с какого момента закон перестанет действовать?

В работах [9–11] необратимость процессов, составляющая суть второго закона, была связана с принципом наименьшего действия, распространение которого на вакуумные и твердотельные электронные приборы привело к формулировке принципа минимизации интегрального лагранжиана. При этом было показано, что принципы минимума диссипации энергии Онсагера, минимума производства энтропии Пригожина, максимума информационной энтропии Хакена [5] сохраняют свою силу даже в существенно нелинейных стационарных режимах, не удовлетворяющих принципу локального равновесия. Наряду с ними существуют величины, которые могут обладать более сильными экстремальными свойствами. Переход от электронных приборов к закрытым системам с однородным распределением частиц [11] привел к известным соотношениям равновесной термодинамики. При этом выяснилось, что в электронных приборах, описываемых уравнениями механики, как и в термодинамических системах, удовлетворяющих принципу локального равновесия, порядок устанавливается по общему правилу, но способы его достижения различны. В настоящей статье принцип минимизации интегрального

лагранжиана распространяется на более широкий круг явлений.

Асимметрия энергетических превращений

Согласно принципу наименьшего действия интеграл $S = \int_{t_1}^{t_2} L(q, \dot{q}, t) dt$ вдоль реальной траектории достигает минимума. Длительность временного интервала $t_1 \leq t \leq t_2$ не имеет значения, поэтому естественно считать, что во всех физически реализуемых случаях минимум действию обеспечивает функция Лагранжа $L(q, \dot{q}, t)$, обладающая тем свойством, что на любом конечном интервале $\Delta t = t_2 - t_1$ ее среднее значение вдоль истинного пути, определяемое как

$$\Lambda = \frac{\int_{t_1}^{t_2} L(q, \dot{q}, t) dt}{\Delta t}, \quad (1)$$

является минимальным, т.е. $\Lambda = \Lambda_{\min}$. Функционал (1) назовем интегральным лагранжианом, или лагранжианом Λ .

Потенциальная энергия определяется в механике с точностью до постоянной величины. Рассматривая случай, когда силы являются потенциальными, полагая функцию Лагранжа не зависящей от времени, запишем ее в виде

$$L = k(q, \dot{q}, t) - p(q, \dot{q}, t) + \Gamma,$$

где $k(q, \dot{q}, t)$ и $p(q, \dot{q}, t)$ — кинетическая и потенциальная энергия в момент времени t , $\Gamma > 0$ — константа. Из (1) и условия минимума следует

$$\Lambda_{\min} = (w_k + \Gamma - w_p)_{\min}. \quad (2)$$

Здесь $w_k = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_1}^{t_2} k(q, \dot{q}, t) dt$, $w_p = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_1}^{t_2} p(q, \dot{q}, t) dt$ — средние на интервале Δt значения кинетической и по-

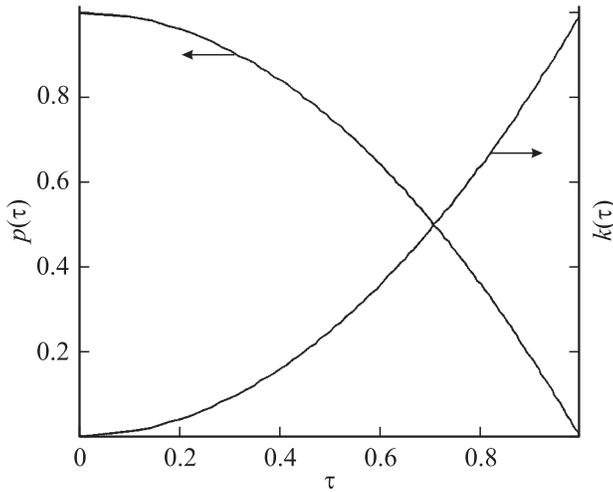


Рис. 1.

тенциальной энергии. Пусть

$$\Gamma = k + p = w_k + w_p \quad (3)$$

— полная энергия системы. Учитывая, что $w_k \geq 0$, из (2) получим

$$\Lambda_{\min} = 2(w_k)_{\min} = 2(\Gamma - w_p)_{\min}, \quad (4)$$

откуда следует, что в процессе движения среднее значение кинетической энергии стремится к минимальному, а потенциальной энергии — к максимальному значению. Это свидетельствует об асимметрии энергетических превращений: полная энергия системы преобразуется так, что большая часть переходит в потенциальную энергию.

Перейдем к примерам. Рассмотрим груз массой m , падающий с высоты H с ускорением g , и маятник, угол отклонения которого может устанавливаться в пределах $0 \leq \varphi_0 \leq \pi$. Для груза, пролетающего координату $h \leq H$ со скоростью $u(h)$, и для маятника, пересекающего угол ψ со скоростью $l\dot{\psi}$, полная энергия и функция Лагранжа в системе единиц $h = h/H$, $m = g = l = H = 1$ имеют вид

$$\Gamma_L = 1 = h + 0.5u^2(h), \quad L_L = 0.5u^2(h) + (1 - h),$$

$$\Gamma_P = (1 - \cos \varphi_0) = (1 - \cos \psi) + 0.5\dot{\psi}^2,$$

$$L_P = 0.5\dot{\psi}^2 + \cos \psi - \cos \psi_0.$$

Время падения груза $T_L = \sqrt{2}$, текущее время $t = \sqrt{2}(1 - h)$, относительное время $\tau = t/T_L = \sqrt{1 - h}$. Четверть периода колебания, в течение которого маятник поднимется на угол φ_0 , и время подъема на угол Ψ находятся из выражений $T_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \int_0^{\varphi_0} \frac{d\psi}{\sqrt{\cos \psi - \cos \varphi_0}}$,

$$t = \frac{1}{\sqrt{2}} \int_0^{\psi} \frac{d\psi}{\sqrt{\cos \psi - \cos \varphi_0}}, \quad \text{безразмерное время } \tau = t/T_0.$$

На рис. 1 представлены зависимости потенциальной $p(\tau) = h$ и кинетической $k(\tau) = 0.5u^2(h)$ энергий груза от времени падения τ . Видно, что всюду зависимость $p(\tau)$ выпукла вверх, а зависимость $k(\tau)$ —

вниз. Площади под этими зависимостями определяют, в соответствии с (1), средние за время падения значения $w_p = \int_0^1 p(\tau) d\tau = 2/3$, $w_k = \int_0^1 k(\tau) d\tau = 1/3$,

$\Gamma = \int_0^1 p(\tau) + k(\tau) d\tau = 1$. Асимметрия энергетического преобразования выражается отношением $w_p/w_k = 2$.

У маятника значения функций $p(\tau) = (1 - \cos \psi)$ и $k(\tau) = \cos \psi - \cos \varphi_0$ зависят от угла отклонения φ_0 . Для наглядности обе функции, рассчитанные при $\varphi_0 = 3\pi/4$, приведены на рис. 2. Видно, что площадь под кривой $p(\tau)$ больше, чем под кривой $k(\tau)$. Выражаемые через эти площади средние за период значения энергий $w_p(\varphi_0) = \int_0^1 p(\tau) d\tau$ и $w_k(\varphi_0) = \int_0^1 k(\tau) d\tau$ представлены на рис. 3 в зависимости от угла отклонения φ_0 . Видно, что неравенство $w_p(\varphi_0) \geq w_k(\varphi_0)$ выполняется во всем диапазоне значений φ_0 .

В приведенных примерах энергия $w_p \geq w_k$ выступает как мера инерции тел.

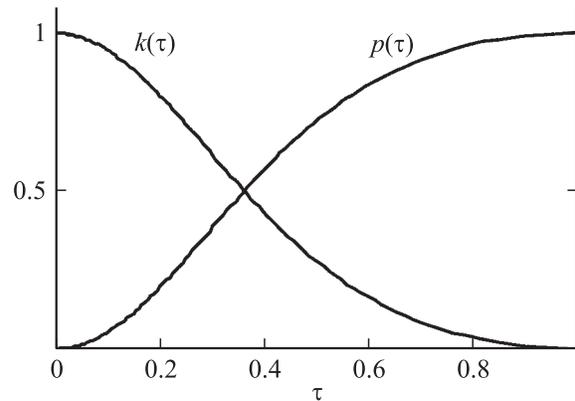


Рис. 2.

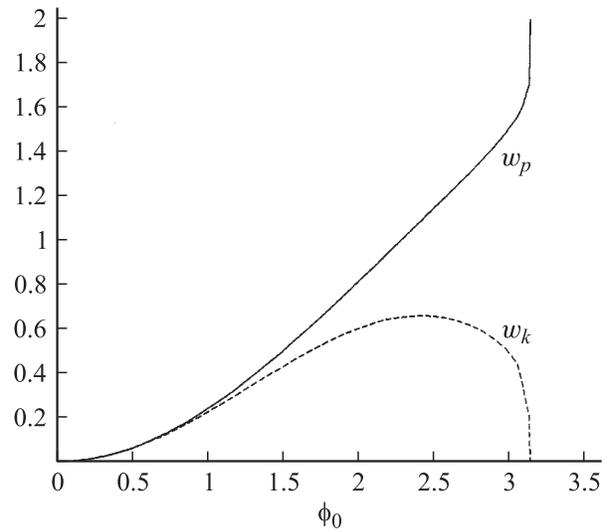


Рис. 3.

Глобальная эволюция

Пусть в объеме V системы содержится большое число N частиц, способных взаимодействовать друг с другом и с приложенными извне полями посредством собственных полей. Введем интегральный лагранжиан системы

$$\Lambda = \frac{\int_V \langle \Lambda \rangle ndV}{\int_V ndV} = \frac{\int_V \langle \Lambda \rangle ndV}{N}. \quad (5)$$

В этом выражении n — концентрация частиц в элементе dV объема системы; $\langle \Lambda \rangle$ — среднее значение их лагранжианов в dV , каждый из которых вычисляется по формуле (1) на одном интервале времени $\Delta t = t_2 - t_1$, настолько малом, что замещением числа частиц в элементах dV и объеме V можно пренебречь. В установившемся состоянии системы интегральный лагранжиан стремится [9,11] к наименьшему значению

$$\Lambda_{\min} = (w_N - w_p)_{\min} + (w_k)_{\min} = 2(w_k)_{\min}, \quad (6)$$

допускаемому условиями на границах с внешней средой. В этом выражении $w_N = W_N/N$, $w_p = W_p/N$, $w_k = W_k/N$, где W_N , W_p , W_k — соответственно полная энергия системы частиц и составляющие ее потенциальная и кинетическая энергии. Формула (6) аналогична (2) и (4).

Под материальной структурой будем понимать совокупность N частиц, которая характеризуется потенциальной энергией W_p связей, определяющих пространственное распределение частиц. Кооперативной будем считать структуру, частицы которой объединены устойчивыми долговременными связями. Процесс самопроизвольного образования структур, протекающий без специфического воздействия на частицы извне, будем называть [3] самоорганизацией.

Рассмотрим запаянный сосуд, который содержит N однородных атомов газа (например, кислорода). Сосуд помещен в термостат. Понижая температуру T , будем следить за фазовыми превращениями. Упругие столкновения не меняют энергию системы, поэтому, пренебрегая силами взаимодействия (т. е. энергией W_p) в пределах каждой фазы, будем фиксировать только результат этого взаимодействия после фазового перехода.

В принятом приближении интегральный лагранжиан атомарной системы с точностью до постоянного слагаемого, что в данном случае не имеет принципиального значения, описывается выражением

$$\begin{aligned} \Lambda_a &= \frac{1}{N} \sum_i \left(-mc^2 \sqrt{1 - \frac{u_i^2}{c^2}} \right) \\ &\cong \frac{1}{N} \sum_i (-mc^2 + 0.5mu_i^2) \cong -mc^2 + w_{ka}, \end{aligned}$$

где c — скорость света, m — масса атома, u_i — скорость i -й частицы, w_{ka} — среднее значение тепловой энергии атома. Гамильтониан

$$\Gamma_a \cong mc^2 + w_{ka}$$

устанавливает аналогию $mc^2 = W_p/N = w_p$.

Будем следить за сближением двух частиц. При медленном понижении температуры лагранжиан пары

$$\Lambda_{1,2} = \frac{L_1 + L_2}{2} \cong -mc^2 + \frac{mu_1^2}{4} + \frac{mu_2^2}{4}$$

будет уменьшаться за счет снижения скоростей u_1 , u_2 . По мере того как энергия относительного движения будет приближаться к нулю, значение лагранжиана будет стремиться к минимуму (на рис. 3 этому соответствует область значений $\varphi_0 \rightarrow 0$), атомы сольются в молекулу с выделением фотона, который поглотится термостатом. Чем меньше температура, тем больше вероятность слияния атомов. По окончании этого фазового перехода получим систему из $N/2$ молекул с лагранжианом

$$\Lambda_m \cong -2(m - \Delta m_m)c^2 + w_{km}.$$

Здесь $\Delta m_m \ll m$ — приходящийся на один атом дефект массы, породивший фотон. Под знаком w_{km} объединены все формы усредненной тепловой энергии молекулы (индекс „ m “ означает молекулу). По сравнению с атомарной системой значение лагранжиана уменьшилось практически в два раза.

Понизим температуру и превратим газ в жидкость. Рентгеноструктурный анализ показывает, что жидкость состоит из большого числа беспорядочно ориентированных кристалликов субмикронных размеров — субтаксических областей. Взаимное расположение соседних частиц в таких областях сходно с упорядоченным расположением соседних частиц в кристаллах: частицы не перемещаются внутри области, а колеблются около положений равновесия. Средний размер области, число и время жизни содержащихся в ней частиц зависят от температуры. При среднестатистическом числе N_l атомов в области интегральный лагранжиан жидкости будет иметь вид

$$\Lambda_l \cong -\langle N_l \rangle (m - \Delta m_m - \Delta m_l)c^2 + \langle N_l \rangle w_{kl},$$

где Δm_l — приходящийся на один атом дефект массы, определяющий энергию связи атомов в жидкости; w_{kl} учитывает тепловую энергию атомов жидкости.

Понизим температуру и превратим жидкость в твердое тело. В идеальном кристалле установится дальний порядок. Все атомы колеблются относительно неподвижных центров равновесия, находящихся в узлах кристаллической решетки. Лагранжиан твердой фазы принимает вид

$$\Lambda_s \cong -N(m - \Delta m_m - \Delta m_l - \Delta m_s)c^2 + Nw_{ks},$$

где Δm_s — приходящийся на один атом дефект массы, определяющий энергию связи атомов в твердом теле; w_{ks} — тепловая энергия атома.

Очевидны цепочки неравенств:

$$\begin{aligned} \Lambda_a &> \Lambda_m > \Lambda_l > \Lambda_s, & \Delta m_m &> \Delta m_l > \Delta m_s, \\ w_{ka} &> w_{km} > w_{kl} > w_{ks}. \end{aligned} \quad (7)$$

Устойчивое объединение элементов назовем кооперацией, а образовавшуюся структуру — кооперативной структурой. Кооперативными структурами являются: кристалл; сиботаксическая область в жидкости; молекула, состоящая из нескольких атомов; атом, состоящий из ядра и электронов; ядро, состоящее из нуклонов, и т.д. Чем больше число N частиц в структуре, тем меньше значение интегрального лагранжиана системы, тем больше потенциальная энергия $W_p = mc^2N$, пропорциональная массе структуры.

Рождение новой кооперативной структуры можно сравнить с работой тепловой машины. Покажем это на примере рождения молекулы. Вместо энергии нагревателя имеем энергию двух атомов, которую запишем в виде гамильтониана

$$\Gamma_{1,2} = mc^2 + mc^2 + 0.5mu_1^2 + 0.5mu_2^2.$$

Результатом работы является молекула, энергия которой при пренебрежении скоростями частиц близка к значению $2(m - \Delta m)c^2$. Фотон с энергией $\cong 2\Delta mc^2$ поглотился внешней средой. Коэффициент полезного действия машины

$$\eta \cong 1 - \Delta m/m.$$

Из цепочки неравенств (7) следует, что эффективность тепловой машины снижается по мере роста температуры окружающей среды. В ранней Вселенной температура была высока, эффективность „тепловой машины“ близка к нулю, что, возможно, и предопределило появление и аннигиляцию частиц и античастиц.

Итак, в каждой фазе вещество характеризуется своим лагранжианом, кооперативной структурой, энергией теплового движения w_{kj} , требующей отличных методов статистического описания. После каждого фазового перехода значение лагранжиана резко меняется. Качественный вид зависимости изображен на рис. 4.

При перемещении вверх по шкале температур кооперативная масса уменьшается, и в пределе приходим к частице с нулевой массой. Движение безмассовой частицы характеризуется энергией E и импульсом \mathbf{p} . Элементарное действие запишем, по Лейбницу и Мопертюи, в виде произведения $\mathbf{p}ds = \mathbf{p}cdt = Edt$, где ds — элемент пути. Действие имеет вид $\int_{t_1}^{t_2} Edt$. Полагаем, что частица движется с постоянной скоростью, равной скорости света c . Векторы \mathbf{p} и \mathbf{c} — коллинеарные. Введем коэффициент пропорциональности m и представим импульс в форме $\mathbf{p} = m\mathbf{c}$. Элемент действия принимает вид $\mathbf{p}ds = mc^2 dt = Edt$. Согласно принципу Ферма[12], расстояние $ds = ds$ между двумя точками пути безмассовая частица проходит за кратчайшее время $dt = ds/c$, которое определяется точно и потому вариации не подлежит. Единственным варьируемым параметром является энергия E , которая, согласно принципу наименьшего действия, должна быть минимальной. Энергия уменьшалась, например, в процессе расширения Вселенной, и когда ее значение достигло некоего предельного

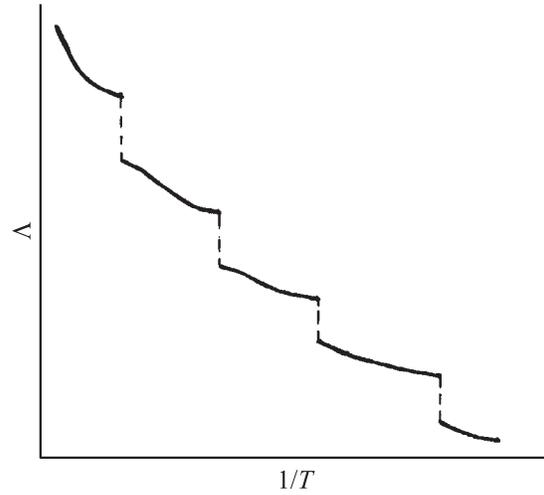


Рис. 4.

значения E_{\min} , наступила бифуркация, завершившаяся переходом безмассовой частицы в новое состояние, характеризующееся массой. Точка бифуркации определяет значение коэффициента $m = E_{\min}/c^2$.

С. Вейнберг в Нобелевской лекции [13] отметил, что массы элементарных частиц могли бы быть намного больше, поскольку для их ограничения не придумано никакой причины. Приведенный пример показывает, что ограничение на сверхбольшие массы накладывает принцип минимизации Λ . Он может быть ответственным и за появление барионного заряда Вселенной.

В космологии структурами являются звезды, галактики. Горящую звезду можно считать системой, находящейся в состоянии фазового перехода, в течение которого синтезируются более тяжелые элементы. Излучение рассеивается в космическом пространстве, интегральный лагранжиан звезды непрерывно уменьшается. По окончании фазового перехода звезда превратится в белого карлика, нейтронную звезду или черную дыру, т.е. в новое образование, плотность материи в котором окажется больше, чем в предыдущем состоянии, а интегральный лагранжиан меньше.

Таким образом, создание массы как формы существования потенциальной энергии, и структурообразование, выражающееся в концентрации материи в локальных областях пространства, вытекают из принципа минимизации Λ . Асимметрия энергетических преобразований проявляется в том, что нормированное и ненормированное значения потенциальной энергии всегда стремятся к пределам $(w_p)_{\max}$ и $(W_p)_{\max}$, допускаемым внешней средой.

Экстремумы стационарного состояния

Совместное использование уравнений механики и принципа минимизации Λ для описания процессов в электронных приборах, содержащих произвольное число электронов, приводит [9,11] к двум законам сохранения

энергии. В установившемся режиме все величины, входящие в эти законы, достигают экстремальных значений:

$$(W_N)_{\max} = (W_p + A)_{\max} + (W_k)_{\min}, \quad (8)$$

$$(W_0)_{\max} = A_{\max} + (W_a)_{\min}, \quad (9)$$

$$\eta_{\max} = 1 - \frac{(W_a)_{\min}}{(W_0)_{\max}}, \quad \langle \tau \rangle = \langle \tau \rangle_{\max},$$

$$\xi = \xi_{\min}, \quad \theta = \theta_{\min}. \quad (10)$$

В левой части (8) величина W_N представляет собой полную энергию, сосредоточенную внутри объема V системы. После нормировки на полное число частиц формула (8) по физическому смыслу приближается к гамильтониану (3). Отличие состоит лишь в том, что в (8) помимо потенциальной энергии W_p входит также динамическая работа A . W_p учитывает взаимодействие электронов друг с другом и характеризует электростатическую энергию образованной ими структуры. Если структура кооперативная и к тому же обладает коллективной степенью свободы (например, уединенная волна в магнетронном диоде, или домен в диоде Ганна), то, перемещаясь в поле внешних сил, она выполняет работу A . Таким образом, сумма $(W_p + A)$ характеризует полную энергию структуры. W_k представляет собой кинетическую энергию некогерентных (независимых) перемещений частиц относительно структуры.

Закон сохранения энергии (9) учитывает взаимодействие системы с внешней средой и выполняется на интервале времени $\langle \tau \rangle$, равном среднему времени жизни частиц в приборе. Энергия W_0 поступает из внешней среды. Часть этой энергии расходуется на выполнение динамической работы A , другая часть W_a рассеивается внутри прибора (если прибор твердотельный) или на его электродах.

Экстремумы величин, входящих в формулы (8)–(10), свидетельствуют об асимметрии энергетических преобразований и могут трактоваться так. Система большого числа частиц всегда организуется таким образом, чтобы как можно большая часть энергии W_N была аккумулирована в потенциальной энергии W_p структуры, в первую очередь, за счет минимизации энергии W_k , на что указывают соответствующие индексы. У кооперативной динамической структуры имеется возможность дополнительно увеличить потенциальную энергию W_p с помощью работы A_{\max} , которую структура выполняет с максимальной эффективностью η_{\max} , перестраивая свое внутреннее устройство таким образом, чтобы наряду с дальнейшей минимизацией W_k заполнить максимум энергии $(W_N)_{\max}$. При этом вместе с W_N возрастает, как правило, и потребляемая энергия W_0 . Сказанное подтверждается многочисленными опытами. Известно, что динамические (диссипативные) структуры появляются в открытых системах в результате развития неустойчивости [2–4,6], которая растет до тех пор, пока не вступят в действие ограничения, учитываемые в уравнениях посредством нелинейности, дисперсии и диссипации.

Эффективность η динамической работы A определяется уровнем кооперации частиц, который количественно характеризуется коэффициентом $\xi_{\min} = 1 - \eta_{\max}$ [10]. Чем выше корреляция частиц, тем меньше ξ_{\min} . При вакууме коореляций имеем $\xi = 1$, $A = 0$, $\eta = 0$, и вся потребляемая энергия W_0 преобразуется системой в тепловую энергию W_a . Энергия W_a производит энтропию [10,11], которая с теплом поступает во внешнюю среду. Индекс „min“ можно рассматривать как подтверждение того, что принципы Онсагера и Пригожина в сильно неравновесных условиях не нарушаются. Остается добавить, что энергии W_k и W_a связаны соотношением

$$(W_k)_{\min} = \theta_{\min}(W_a)_{\min}, \quad (11)$$

где коэффициент θ , стремящийся к минимуму, характеризует [9,10] неоднородность распределения энергии W_k в системе и является одним из параметров ($0 < \theta \leq 1$) установившегося режима. Из соотношения (11) следует, что энергия $(W_k)_{\min}$ в общем случае обладает более сильными экстремальными свойствами, чем $(W_a)_{\min}$.

Проследим за изменением величин, входящих в формулу (8), для чего внесем виртуальные возмущения δ , например, меняя распределение частиц. В установившемся режиме [9] значение W_p пропорционально квадрату концентрации частиц n^2 , другие виды энергии и работы пропорциональны n , значение W_k зависит от n слабо. Поэтому при возмущениях обнаружим острый максимум у $(W_p + A)$, сравнительно широкий минимум у W_k и, просуммировав значения этих величин, найдем форму максимума у W_N . Влияние возмущений на указанные величины качественно изображено на рис. 5. Устойчивость стационарного состояния обеспечивается

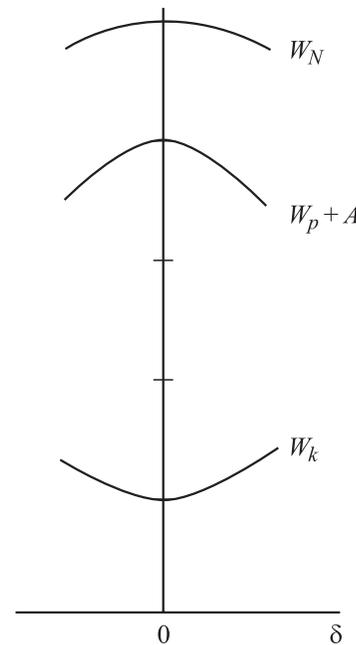


Рис. 5.

наличием минимума у W_k . Запишем для простоты

$$(w_N, w_p, w_a, w_0, a, \langle \tau \rangle, \eta, \theta) = (X_1, X_2, \dots),$$

где $w_i = W_i/N$, $a = A/N$. Состояние системы, характеризующееся (6) минимальным значением $\Lambda_{\min} = 2(w_k)_{\min}$, будет локально устойчивым, если в точке минимума первая и вторая вариации функции w_k будут удовлетворять требованиям

$$\delta_1 w_k = \sum_i \frac{\partial w_k}{\partial X_i} \delta X_i = 0,$$

$$\delta_2 w_k = \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \frac{\partial^2 w_k}{\partial X_i \partial X_j} \delta X_i \delta X_j > 0. \quad (12)$$

Уравнения (6), (8)–(12) описывают стационарное состояние системы с той мерой полноты и точности, которую может обеспечить применение механики в электронике.

Деформация и разрушение

Обобщенную механическую систему, описываемую уравнениями (6), (8)–(12), можно свести к простым случаям. Например, при $\xi = 1$ имеем вакуум корреляций и $A = 0$, что характерно для открытых систем, в которых коллективные явления отсутствуют (вакуумный или полупроводниковый диод). При $W_0 = 0$ имеем закрытую систему, которая может обмениваться с внешней средой энергией, но не веществом.

При $A = 0$, $\theta = 1$ выражение (8) применимо к однородным термодинамическим системам, находящимся в состоянии термодинамического равновесия. При этом имеется [11] соответствие величин

$$W_N \Leftrightarrow TS_t, \quad W_p = \tilde{A} \Leftrightarrow -F, \quad W_k \Leftrightarrow E,$$

где T — абсолютная температура, S_t — термодинамическая энтропия, \tilde{A} — деформационная работа, учитывающая взаимодействие частиц, F — свободная энергия Гельмгольца, E — внутренняя энергия. В новых обозначениях закон сохранения энергии (8) и лагранжиан (6) принимают вид

$$(TS_t)_{\max} = \tilde{A}_{\max} + E_{\min}. \quad (13)$$

$$\Lambda_{\max} = (TS_t)_{\max} - \tilde{A}_{\max} = 2E_{\min}. \quad (14)$$

Из левой части выражения (13) следует, что состояние системы, во всех точках которой температура T одинакова, характеризуется экстремальным значением термодинамической энтропии $(S_t)_{\max}$. Это суть второго закона. Если внести виртуальные возмущения, например, в распределение температуры, то получим формы экстремумов, подобные изображенным на рис. 5. В термодинамических системах выполняется принцип Ле Шателье–Брауна, который описывает [2,14] реакцию на возмущение. Подобие экстремумов означает, что этот

же принцип выполняется и в открытых электронных системах.

В термодинамике доказывалось [15,16], что равновесное состояние устойчиво, если вариация второго порядка внутренней энергии $\delta_2 E$ удовлетворяет требованию

$$\delta_2 E = \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \frac{\partial^2 E}{\partial Y_i \partial Y_j} \delta Y_i \delta Y_j \geq 0. \quad (15)$$

Здесь Y_i, Y_j — характеристические величины, через которые выражается внутренняя энергия. Неравенство (15) (ср. с формулой (12)) означает, что в точке равновесия внутренняя энергия достигает наименьшего значения $E = E_{\min}$. Именно это и отражено в уравнении (13).

Однофазное состояние вещества существует в диапазоне температур $T_1 \leq T \leq T_2$, где T_1 и T_2 — граничные значения. Под воздействием температуры атом колеблется в потенциальной яме, склоны которой можно описать потенциалом Леннарда–Джонса. При $T \cong T_1$ колебания гармонические. При $T = T_2$ вся подведенная к атому энергия будет израсходована на преодоление сил связи, после чего атом перейдет в свободное состояние с нулевой кинетической энергией. Подобным образом ведет себя и маятник, у которого значениям T_1 и T_2 соответствуют углы отклонения $\varphi_0 = 0$ и $\varphi_0 = \pi$. Поэтому общее представление об усредненных по времени значениях энергии E_{\min} и работы \tilde{A}_{\max} атомов в диапазоне температур $T_1 \leq T \leq T_2$ можно получить из рис. 3.

Рис. 3 качественно верно передает соотношение между $W_p \Leftrightarrow \tilde{A}_{\max}$ и $W_k \Leftrightarrow E_{\min}$ всюду за исключением областей, прилегающих к граничным точкам. Термодинамическая система, достигнув этих точек, оказывается в области фазового перехода, где вторая, третья и четвертая вариации внутренней энергии удовлетворяют [16] требованиям

$$\delta_2 E = 0, \quad \delta_3 E = 0, \quad \delta_4 E > 0. \quad (16)$$

В маятнике эти соотношения не действуют по причине иной формы потенциальной функции. Но как для атома, так и для маятника переход через граничные точки влечет за собой переход в иное функциональное пространство.

Из рис. 3 видно, что в граничных точках энергия $E_{\min} \Leftrightarrow (W_k)_{\min}$ (а также лагранжианы (6), (14)) достигает предельно малых значений, равных нулю. При этом из (16) следует, что дно ямы, описываемое на рис. 5 функцией $W_k(\delta)$, становится плоским, кривая W_k сливается с осью абсцисс, локальная устойчивость исчезает. Устанавливается равенство $W_p = W_N$, причем значение этих величин неоднозначно и полностью определяется условиями на границах. Если термостат настроен на понижение температуры, то, потребляя энергию, выделяющуюся при слиянии частиц, он способствует переходу в состояние, характеризующееся повышенной упорядоченностью. При противоположной настройке термостата система будет переходить в менее упорядоченное состояние.

Таким образом, практически во всей области устойчивого равновесия термодинамические системы, подобно механическим системам, находятся в состояниях, в которых потенциальная энергия

$$(W_p)_{\max} \Leftrightarrow \tilde{A}_{\max} \quad (17)$$

превышает кинетическую энергию $(W_k)_{\min} \Leftrightarrow E_{\min}$. Чем ближе температура T к верхнему граничному значению T_2 , тем большая часть полной энергии TS_t системы переходит в потенциальную энергию структуры W_p , которая одновременно является и деформационной работой \tilde{A} , направленной на разрушение структуры. При $T > T_2$ структура разрушается полностью.

Для пояснения сказанного представим скрепленные пружинами грузики, лежащие на гладкой поверхности стола. В состоянии покоя потенциальная энергия системы $W_p = 0$. Воздействуя на какой-либо грузик, совершив деформационную работу \tilde{A} , на которую система отзовется появлением у нее потенциальной энергии $W_p = \tilde{A}$. В термодинамической системе работу \tilde{A} выполняют тепловые колебания. Суммарная энергия фононов, случайно сошедшихся синфазно на одном атоме, может вырвать его из решетки, образовав дефект. Таким образом, равенство (17) выражает единство двух противоположно направленных процессов: система, создавая структуру, стремится максимально увеличить ее потенциальную энергию, которая одновременно является деформационной работой, направленной на разрушение структуры.

Г. Герц, размышляя о природе потенциальной энергии [17, позиции 595, 605], использовал понятие „скрытая масса“: „Те массы, положения которых при полном задании наблюдаемых координат системы остаются неизвестными, называются скрытыми массами, их движения — скрытыми движениями, их координаты — скрытыми координатами. . . Энергия скрытых масс называется потенциальной энергией всей системы“. Это определение расширяет смысловое содержание энергии W_p .

В изолированной термодинамической системе при неизменной температуре число дефектов, создаваемых работой \tilde{A} , в среднем постоянно. Очевидно, что такой же смысл сохраняется за энергией $W_p \Leftrightarrow \tilde{A}$ и в открытой системе. Но открытая система имеет еще один источник дефектов. Им является энергия W_a , которая одновременно участвует в обменном процессе, отображаемом формулой (9), и производит [9,10] энтропию.

Универсальность принципов

Образование структур связано с тем, что при энергетических превращениях часть энергии W_k неорганизованного движения переходит в различные формы потенциальной энергии. Существуют ли системы, в которых такое преобразование невозможно?

Рассмотрим линейный резистор под током. Из-за частых столкновений с дефектами решетки время свободного пролета носителей заряда мало, распределение

дрейфовой и тепловой скоростей однородно, поэтому $\theta = \xi = 1$, $W_p = 0$, $W_k = W_a$, $W_N = W_0$ и стационарное состояние резистора описывается не двумя законами сохранения энергии (8) и (9), а одним — $W_0 = W_a$. Вся подведенная к резистору энергия W_0 рассеивается, превращаясь в тепло, структурообразование отсутствует, индексация экстремумов лишена оснований.

Подобный пример существует и в неравновесной термодинамике. Следуя Н. Моисееву [18], рассмотрим задачу о переносе тепла вдоль однородного стержня. В этом случае, по теории Онсагера, производство энтропии описывается выражением

$$\sigma = \lambda \left(\text{grad} \frac{1}{T} \right)^2,$$

где λ — коэффициент теплопроводности. В соответствии с принципом минимума производства энтропии Пригожина вариация

$$\delta \int \lambda (\text{grad} T^{-1})^2 dr = 0,$$

откуда после интегрирования по частям найдем

$$\text{grad} (T^{-1}) = 0,$$

что не эквивалентно закону Фурье:

$$\text{grad}^2 T = 0.$$

Отсюда следует, что процессы переноса тепла, удовлетворяющие закону Фурье, будут сопровождаться таким производством энтропии, которое не доставляет минимум функционалу $\int \lambda (\text{grad} T^{-1})^2 dr$. Полное решение этой задачи с привлечением численных оценок, подтверждающих сделанный вывод, содержится в работах [19,20].

Отменяют ли приведенные примеры принципы минимизации Λ , минимума диссипации энергии и минимального производства энтропии? Разумеется, нет. Объяснение простое: существуют системы, в которых указанные принципы не выполняются по причине отсутствия условий для преобразования подведенной энергии в потенциальную энергию какого-либо вида. Такие преобразования часто осуществляются не в прямых процессах, отображаемых уравнением (9), а в перекрестных, которые в линейной неравновесной термодинамике учитывают [21,22] посредством недиагональных коэффициентов переноса, связывающих между собой термодинамические силы и потоки. К перекрестным явлениям относятся, например, термоэлектрические эффекты Зеебека, Пельтье, Томсона, термомеханический и механокалорический эффекты. Каждый из этих эффектов может быть описан посредством введения потенциальной энергии W_p определенного вида. И. Пригожин вывел принцип минимума производства энтропии [1], непосредственно учитывая перекрестные явления.

Принципиально важно то, что и в механике, и в термодинамике как прямые, так и перекрестные процессы,

связанные с преобразованием энергии неорганизованных форм движения в различные виды потенциальной энергии W_p и работы A , всегда осуществляются с максимальной эффективностью. В термодинамике это отражено в принципе максимальной работы, а также в принципах минимума энергии диссипации и производства энтропии, в механике — в принципе минимизации лагранжиана Λ , в требовании минимизации энергий W_k и W_a . Из сказанного следует, что максимальное сопротивление хаосу и разрушению является фундаментальным свойством природы.

Область действия принципов Онсагера, Пригожина и Гленсдорфа–Пригожина ограничена слабо неравновесными термодинамическими системами и системами, в которых выполняется принцип локального равновесия. Принцип минимизации Λ свободен от таких ограничений, поэтому он является более универсальным принципом.

Динамические структуры

Мы используем термин „динамическая структура“ вместо „диссипативной структуры“, желая отразить ведущую роль динамической работы в образовании и функционировании таких структур: динамика первична по отношению к диссипации.

Для возникновения динамической структуры необходимо достаточно большое число частиц. В эффекте Ганна [23] минимальное число электронов определяет критерий Кремера, согласно которому для возникновения бегущего домена нужно, чтобы произведение концентрации носителей заряда на длину диода превысило определенное значение. В магнетронном диоде динамика и эволюция коллективных процессов [24,25] также непосредственно зависят от числа электронов. Вместе с тем, например, объемный заряд электронов вакуумного диода не проявляет динамических свойств [9]. В чем причина?

Для появления динамической структуры необходим барьер, преодолеть который частицы могут только объединенными усилиями. В эффекте Ганна барьер порядка 1 eV отделяет верхнюю энергетическую долину от нижней. Домен появится, когда электроны, исходно находящиеся в нижней долине, объединятся под воздействием приложенного электрического поля и, преодолев барьер, попадут в верхнюю долину.

В магнетронном диоде сильное магнитное поле искривляет траекторию электрона, и для достижения анода ему нужно преодолеть барьер, который в приборах средней мощности достигает значений порядка 1000 eV и больше. Для преодоления такого препятствия электроны кооперируются с образованием уединенных волн [9,25], которые своей вершиной касаются анода.

Для возникновения колебаний в автогенераторе крутизна S лампы (транзистора), посредством которой регулируется число электронов, должна превысить пороговое значение $S = (kR)^{-1}$, где k — коэффициент положительной обратной связи, R — резонансное сопротивление колебательного контура.

Другое неперенное условие требует, чтобы к моменту преодоления барьера частицы сумели сформировать структуру, способную взаимодействовать с окружающей средой по принципу положительной обратной связи. В физике такую обратную связь обеспечивает отрицательная дифференциальная проводимость. В электронных приборах ей соответствует зависимость тока I_a от приложенного напряжения U_a вида $\partial I_a / \partial U_a < 0$. Отрицательной дифференциальной проводимостью обладают: диод Ганна в области значений U_a , в которой существует домен; магнетронный диод в режиме уединенных волн; генератор в режиме автоколебаний. У вакуумного и полупроводникового диодов, например, дифференциальная проводимость имеет противоположный знак $\partial I_a / \partial U_a > 0$.

Динамическая структура, зарождающаяся вместе с неустойчивостью, расходует большую часть потребляемой энергии W_0 (9) на динамическую работу A , которую выполняет с максимальной эффективностью (10). В результате суммарная энергия $(W_p + A)$ структуры в формуле (8) растет сначала экспоненциально быстро, затем все медленнее, пока не придет к стационарному состоянию. В течение экспоненциального роста динамическая работа накапливает и уплотняет частицы, наращивая W_p — массу и потенциальную энергию структуры. На этом этапе рост структуры обгоняет производство дефектов. В стационарном состоянии работа A расходуется на сохранение структуры, а энергия W_a , непрерывно производя энтропию, разрушает систему. Дефекты постепенно накапливаются, вызывая старение и гибель структуры. Таким образом, принцип минимизации Λ управляет рождением, старением и гибелью структур.

Экстремумы величин, содержащихся в формулах (8)–(10), указывают на то, что любая динамическая структура стремится получить извне максимальное количество энергии и вещества $(W_0)_{\max}$, отдавая при этом минимальное количество $(W_a)_{\min}$, чтобы не только с предельной эффективностью η_{\max} произвести работу A_{\max} , направленную на максимальное увеличение энергии и вещества $(W_p)_{\max}$ самой же структуры, но и одновременно до минимума снизить производство дефектов в ней.

С физической точки зрения биологические объекты являются динамическими структурами. Конечные ресурсы внешней среды ограничивают их рост и развитие, в действие вступает механизм конкуренции и естественного отбора. Эти два основных фактора и определили эволюцию жизни, в ходе которой эффективность η_{\max} структур повышалась и простейшие микроскопические формы, постепенно усложняясь и укрупняясь, превратились в многоклеточные организмы, в том числе огромных размеров.

Динамический хаос

Зависимость, изображенную на рис. 4, можно трактовать и таким образом: уменьшение лагранжиана Λ сопровождается увеличением числа N частиц в структуре. Верно и обратное утверждение: увеличение N

ведет к уменьшению Λ . Это проявление общего свойства сформулировано в [9] в виде неравенства

$$\partial\Lambda/\partial N < 0. \quad (18)$$

Механизм выполнения неравенства (18) в вакуумных приборах рассмотрен в [9]. Там же показано, что в системах с сильным трением лагранжиан Λ пропорционален квадрату дрейфовой скорости частиц. Следовательно, увеличение числа носителей заряда, например, в полупроводниковом резисторе должно сопровождаться уменьшением их скорости. Это действительно так [26].

Рассмотрим состояние системы, которая находится вдали от точек фазового перехода. Система содержит вещество, способное перемещаться под воздействием внешних сил и расходовать полученную таким образом энергию на создание структуры. Выберем управляющий параметр Z , который влияет на число частиц, вовлекаемых в структуру. Полагаем, что приближение к предельно малому значению $\Lambda = \Lambda_{\text{lim}}$, в котором $\frac{\partial\Lambda}{\partial N} \frac{\partial N}{\partial Z} = 0$, происходит не асимптотически, а при достижимых значениях Z . Дальнейшее развитие системы возможно по двум сценариям. Если система способна перестроиться, образовав структуру нового типа, значение интегрального лагранжиана которой меньше, чем у предыдущей структуры, то произойдет скачкообразный переход к новой структуре. Если такая перестройка невозможна, то после прохождения точки $\Lambda = \Lambda_{\text{lim}}$ значение лагранжиана начнет возрастать (рис. 6), характеризуясь неравенством $\partial\Lambda/\partial N > 0$. Упорядоченность сменится деструктуризацией, устойчивая ранее структура начнет разрушаться, система перейдет в турбулентное состояние, часто именуемое динамическим хаосом.

Описанный сценарий развития наблюдался в магнетронном диоде [24]. Управляющим параметром являлся ток эмиссии I_e , влияющий на число N электронов. При увеличении I_e , начиная с нуля, первыми возникли

коллективные электронные образования, колеблющиеся с частотой порядка 4 GHz. Затем произошел скачкообразный переход к структурам принципиально иного типа — уединенным электронным волнам, динамика которых характеризуется частотой порядка 0.4 GHz. Волна представляет собой вихреобразное электронное образование [25], которое обладает электростатическим зарядом. Вихрь устойчив при ограниченном числе содержащихся в нем электронов. При избыточной эмиссии вихрь быстро достигает критического размера и, теряя устойчивость, „сбрасывает“ часть электронов, приобретает таким образом возможность для нового роста. Сброс „лишних“ электронов аналогичен сдвигу вниз в одномерном распределении Бернулли, или зеркальному отражению относительно горизонтали $y = 1$ в треугольном отображении [27,28]. Стимулированный сбросом новый рост вихря аналогичен операции растяжения в указанных отображениях.

Заключение

Принцип минимизации интегрального лагранжиана, являясь механическим принципом, играет роль, сопоставимую со вторым законом термодинамики. Принцип утверждает, что на всех этапах своего развития, в любых условиях, при любых обстоятельствах Природа стремится с максимальной эффективностью преобразовать кинетическую энергию некогерентного движения частиц в потенциальную энергию W_p , являющуюся характерным признаком материальной структуры. Неравновесная термодинамика также демонстрирует большое число эффективных превращений энергии хаоса в энергию W_p структур разнообразного вида. Таким образом, и механика, и термодинамика приводят к общему выводу: Природа обладает большими творческими возможностями в своей борьбе с энтропией, несущей разрушение и смерть.

Принцип минимизации Λ базируется на принципе наименьшего действия, который встречает неприятие со времен П. Мопертюи. В качестве примера невыполнения принципа часто приводят геодезические линии на поверхности шара [12]. Если начальная точка O и конечная точка P находятся в одном полушарии, то короткая дуга, образованная пересечением сферы плоскостью, проходящей через центр шара и точки O и P , будет действительно наименьшей, но большая дуга — наибольшей. По какому пути прошла изображающая точка из O в P , по кратчайшему или по длиннейшему?

Большой путь состоит из суммы маленьких путей, большая дуга состоит из суммы маленьких дуг. Последовательное применение принципа приводит к правильному результату.

Автор благодарен В.Ю. Петрунькину, высказавшему полезные замечания при чтении рукописи, и руководству АО „Аргус-Спектр“ за поддержку.

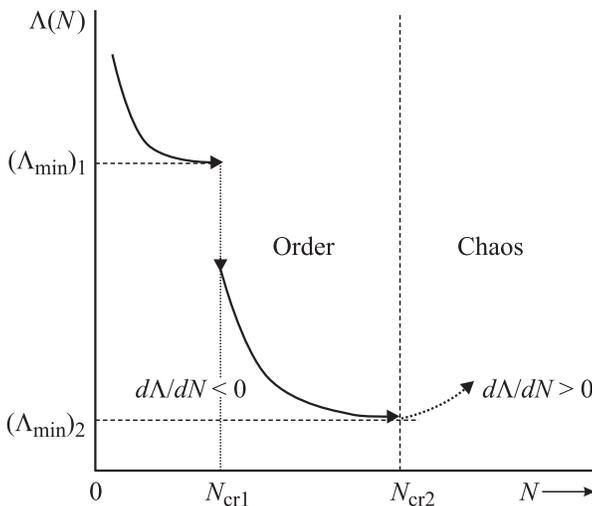


Рис. 6.

Список литературы

- [1] Пригожин И. Введение в термодинамику необратимых процессов. М.–Ижевск: РХД, 2001. 160 с.
- [2] Гленсдорф П., Пригожин И. Термодинамическая теория структуры, устойчивости и флуктуаций. М.: Мир, 1973. 280 с.
- [3] Хакен Г. Синергетика. М.: Мир, 1980. 404 с.
- [4] Хакен Г. Синергетика. Иерархии неустойчивостей в самоорганизующихся системах и устройствах. М.: Мир, 1985. 419 с.
- [5] Хакен Г. Информация и самоорганизация. Макроскопический подход к сложным системам. М.: Мир, 1991. 240 с.
- [6] Эбелинг В., Энгель А., Файстель Р. Физика процессов эволюции. М.: Едиториал УРСС, 2001. 328 с.
- [7] Чернавский Д.С. Синергетика и информация. М.: Наука, 2001. 244 с.
- [8] Галимов Э.М. Феномен жизни. Между равновесием и нелинейностью. Происхождение и принципы эволюции. М.: Едиториал УРСС, 2001. 256 с.
- [9] Усыченко В.Г. // ЖТФ. 2004. Т. 74. вып. 11. С. 38–46.
- [10] Усыченко В.Г. // ЖТФ. 2005. Т. 75. Вып. 5. С. 19–27.
- [11] Усыченко В.Г. // ЖТФ. 2006. Т. 76. Вып. 4. С. 17–25.
- [12] Зоммерфельд А. Механика. М.–Ижевск: РХД, 2001. 368 с.
- [13] Weinberg S. // Rev. Mod. Phys. 1980. Vol. 52. P. 121.
- [14] Ландау Л., Лифшиц М. Статистическая физика. М.: Физматлит, 2005. 616 с.
- [15] Кубо Р. Термодинамика. М.: Мир, 1970. 304 с.
- [16] Новиков И.И. Термодинамика спинодалей и фазовых переходов. М.: Наука, 2000. 164 с.
- [17] Герц Г. Принципы механики, изложенные в новой связи. М.: АН СССР, 1959. 386 с.
- [18] Моисеев Н.Н. Алгоритмы развития. М.: Наука, 1987. С. 60.
- [19] Петров Ю.П. // Биофизика. 1966. № 5. С. 926.
- [20] Петров Ю.П. Вариационные методы теории оптимального управления. Л.: Энергия, 1977. 280 с.
- [21] Базаров И.П., Геворкян Э.В., Николаев П.Н. Неравновесная термодинамика и физическая кинетика. М.: МГУ, 1989. 240 с.
- [22] Квасников И.А. Термодинамика и статистическая физика. Теория равновесных систем. М.: МГУ, 1987. 560 с.
- [23] Левинштейн М.Е., Пожела Ю.К., Шур М.С. Эффект Ганна. М.: Сов. радио, 1975. 288 с.
- [24] Смирнов А.В., Усыченко В.Г. // Радиотехника и электроника. 1991. Т. 36. № 1. С. 151.
- [25] Усыченко В.Г. // Радиотехника и электроника. 2001. Т. 46. № 12. С. 1489–1498.
- [26] Зи С. Физика полупроводниковых приборов. Т. 1. М.: Мир, 1984. 456 с.
- [27] Шустер Г. Детерминированный хаос. М.: Мир, 1988. 240 с.
- [28] Данилов Ю.А. Лекции по нелинейной динамике. М.: Постмаркет, 2001. 190 с.