УДК: 539.3

К ТЕОРИИ РЕЛАКСАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В ТВЕРДОМ ТЕЛЕ

***М.Ю. Ковалевский*[*,**]*, В.Т. Мацкевич*[*]*, Н.Н. Чернышов*[*]**

[*]*ННЦ «Харьковский физико-технический институт», г. Харьков, Украина;*

[**]*Белгородский государственный университет, г. Белгород, Россия*

Предложенная нами теория упругости как раздел механики сплошной среды основывается на представлении о спонтанно нарушенной трансляционной симметрии. Динамической величиной в наборе параметров сокращенного описания, связанной с таким нарушением симметрии, является тензор деформаций Коши, который представлен в терминах тензора дисторсии. Построена теория упругости с учетом процессов диссипации. Выяснено, что структура диссипативных потоков для изотропного твердого тела содержит дополнительно, помимо коэффициентов теплопроводности и вязкости, еще два кинетических коэффициента вязкоупругости, которые отражают влияние упругих деформаций на релаксационные процессы.

ВВЕДЕНИЕ

Реалистическая динамическая теория твердого тела требует учета влияния релаксационных процессов на эволюцию структуры и свойств среды. Разрабатываемые в теории упругости подходы в значительной мере имеют модельный характер. Учет температурных и временных эффектов существенно усложняет описание процесса пластического и упругого формоизменения материалов. Ключевой проблемой здесь является нахождение тензора напряжений как функции термодинамических параметров.

Формулировка предложенной нами теории упругости как раздела механики сплошной среды основывается на представлении о спонтанно нарушенной трансляционной симметрии. Динамической величиной в наборе параметров сокращенного описания, связанной с таким нарушением симметрии, является тензор деформаций Коши, который представим в терминах тензора дисторсии. Последняя величина полностью отображает характер деформации сплошной среды, однако введение ее в качестве дополнительной динамической величины, как правило, избыточно.

Развитый нами гамильтонов подход позволил построить теорию упругости с учетом процессов диссипации. Плотности потоков аддитивных интегралов движения представлены в терминах термодинамического потенциала. Выяснена общая структура релаксационных слагаемых в динамических уравнениях упругости твердого тела с произвольной кристаллической решеткой. Детально рассмотрен случай изотропного твердого тела.

СОКРАЩЕННОЕ ОПИСАНИЕ И СКОБКИ ПУАССОНА

Вопрос выбора параметров сокращенного описания динамики конденсированных сред обусловлен рядом факторов. Часть из них связана со свойствами симметрии гамильтониана, что проявляется наличием динамических уравнений, обусловленных дифференциальными законами сохранения. В случае низкоразмерных конденсированных сред $(d < 3)$ в присутствии внешних сильных полей и благодаря взаимодействиям, приводящим к нескольким характерным временам релаксации, в набор параметров сокращенного описания входят некоторые определенные функции параметра порядка. При этом поведение таких величин может и не являться гидродинамическим. Последнее означает, что если волновой вектор $k \to 0$, то время релаксации $\tau \to \infty$.

Работа базируется на гамильтоновом подходе, который характеризуется заданием гамильтониана как функции параметров сокращенного описания, для которых необходимо знать набор скобок Пуассона динамических переменных, лежащих в основе построения уравнений динамики нормальных жидкостей, кристаллов и жидких кристаллов [1-3]. Такими переменными в теории упругости являются плотность импульса, плотность энтропии, тензор дисторсии и связанный с ним тензор деформаций Коши. Общим требованием выбора параметров сокращенного описания является замкнутость алгебры скобок Пуассона (СП) такого набора величин. Построение СП для всего набора динамических переменных и представляет основную проблему.

ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ

В рамках гамильтонова подхода сформулируем дифференциальные законы сохранения, связанные с симметрией гамильтониана. Генераторами преобразований группы симметрии гамильтониана являются аддитивные интегралы движения. Законы сохранения в дифференциальной форме имеют вид:

$$\dot{\zeta}_a(x) = -\nabla_k \zeta_{ak}(x) . \tag{1}$$

Здесь $\zeta_a(x) = \varepsilon(x), \pi_i(x)$ – плотности аддитивных интегралов движения; $\varepsilon(x)$ – плотность энергии и

Серия: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение (89), с.74-77.

$\pi_i(x)$ – плотность импульса; $\zeta_{ak}(x) = q_k(x), t_{ik}(x)$ – соответствующие им плотности потоков. Величина $a = (0, k = 1,2,3)$, что соответствует наличию четырех интегралов движения – гамильтониану и импульсу:

$$H \equiv \int d^3x\varepsilon(x) \equiv \int d^3x\zeta_0(x);$$
$$P_k \equiv \int d^3x\pi_k(x) \equiv \int d^3x\zeta_k(x). \qquad (2)$$

Наблюдается представление плотностей потоков аддитивных интегралов движения $\zeta_{ak}(x)$ в терминах (СП) от соответствующих плотностей $\zeta_a(x)$ [4,5]

$$\zeta_{ak}(x) = -\delta_{ak}\varepsilon(x) + \int d^3x' x_k' \int_0^1 d\lambda \{\zeta_a(y), \varepsilon(y')\};$$
$$a \neq 0,$$
$$\zeta_{0k}(x) = \frac{1}{2}\int d^3x' x_k' \int_0^1 d\lambda \{\varepsilon(y), \varepsilon(y')\},$$
$$(y \equiv x + \lambda x', y' \equiv x - (1-\lambda)x'). \qquad (3)$$

Введем в рассмотрение тензор дисторсии

$$b_{ki}(x) \equiv \delta_{ki} - \nabla_i u_k(x), \qquad (4)$$

который определяется в терминах вектора смещения $u_k(x)$, связывающего лагранжеву координату ξ_k с эйлеровой координатой x_k: $x_k = \xi_k + u_k(x)$. Тензор дисторсии $b_{ki}(x)$ задает ориентационные и трансляционные состояния произвольной непрерывной среды.

Известно, что СП физических переменных $u_i(x), \pi_i(x), \sigma(x)$ имеют следующий вид [1-3]:

$$\{\pi_i(x), \sigma(x')\} = -\sigma(x)\nabla_i\delta(x - x');$$
$$\{\pi_i(x), \pi_k(x')\} = \pi_k(x)\nabla_i'\delta(x - x') - \pi_i(x')\nabla_k\delta(x - x');$$
$$\{u_i(x), \pi_k(x')\} = b_{ik}(x)\delta(x - x'), \qquad (5)$$

где $\sigma(x)$ – плотность энтропии.

Гамильтониан рассматриваемой вязкоупругой среды в общем случае является функционалом следующих физических величин:

$$H = \int d^3x\varepsilon(x), \varepsilon(x; \sigma(x'), \pi_i(x'), b_{ij}(x')). \qquad (6)$$

В силу свойства трансляционной инвариантности плотность энергии $\varepsilon(x)$ зависит только от тензора дисторсии $b_{ij}(x)$. Согласно (4), (5), СП тензора дисторсии $b_{ij}(x)$ с плотностью импульса $\pi_i(x')$ равна

$$\{b_{ij}(x), \pi_k(x')\} = -b_{ik}(x')\nabla_j\delta(x - x'). \qquad (7)$$

Используя СП (5), (7), получим нелинейные функциональные уравнения динамики упругой среды:

$$\dot{\sigma}(x) = -\nabla_i\left(\sigma(x)\frac{\delta H}{\delta\pi_i(x)}\right);$$
$$\dot{b}_{ik}(x) = -\nabla_k\left(b_{ij}(x)\frac{\delta H}{\delta\pi_i(x)}\right);$$
$$\dot{\pi}_i(x) = -\pi_j(x)\nabla_i\frac{\delta H}{\delta\pi_j(x)} - \nabla_j\left(\pi_i(x)\frac{\delta H}{\delta\pi_j(x)}\right) -$$
$$- b_{ki}(x)\nabla_j\frac{\delta H}{\delta b_{ki}(x)} - \sigma(x)\nabla_i\frac{\delta H}{\delta\sigma(x)}. \qquad (8)$$

Уравнения (8) и общий функциональный вид плотности энергии (6) описывают неравновесные процессы сплошных сред с произвольным характером пространственных неоднородностей и являются весьма сложными для анализа. Значительное упрощение возникает при исследовании этих уравнений в длинноволновом приближении, когда пространственные неоднородности динамических величин малые.

УРАВНЕНИЯ УПРУГОСТИ В АДИАБАТИЧЕСКОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

Получим уравнения теории упругости из общих динамических уравнений (8). Введем в рассмотрение тензор деформаций Коши:

$$u_{ij}(x) \equiv b_{\lambda i}(x)b_{\lambda j}(x). \qquad (9)$$

Принимая во внимание СП (7), найдем вид СП для плотности импульса и тензора деформаций:

$$\{u_{ij}(x), \pi_k(x')\} = -u_{jk}(x)\nabla_i\delta(x - x') -$$
$$- u_{ik}(x)\nabla_j\delta(x - x') - \delta(x - x')\nabla_k u_{ij}(x). \qquad (10)$$

В теории упругости плотность энергии в локальном приближении

$$\varepsilon(x) \equiv \varepsilon(\sigma(x), \pi_i(x), u_{ij}(x)) \qquad (11)$$

зависит от тензора дисторсии только посредством тензора деформаций [6]. В соответствии с выражением (11) выпишем второе начало термодинамики для рассматриваемых систем:

$$d\sigma = \frac{\partial\sigma}{\partial u_{ik}}du_{ik} + Y_0 d\varepsilon + Y_k d\pi_k. \qquad (12)$$

Введем в рассмотрение термодинамический потенциал как функцию термодинамических параметров и тензора деформаций равенством

$$\omega \equiv -\sigma + \zeta_a\frac{d\sigma}{d\zeta_a}$$

и перепишем второе начало термодинамики в эквивалентном виде:

$$d\omega = \frac{\partial\omega}{\partial u_{ik}}du_{ik} + \varepsilon dY_0 + \pi_k dY_k.$$

Здесь термодинамические силы определены равенствами $Y_a = \partial\sigma / \partial\zeta_a$. Используя СП (5), (7), (10) и формулы (3), получим выражение для плотностей потоков в терминах термодинамического потенциала:

$$\zeta_{ak} = -\frac{\partial}{\partial Y_a}\left(\frac{\omega Y_k}{Y_0}\right) + \frac{\partial \omega}{\partial u_{kl}}\frac{\partial}{\partial Y_a}\left(\frac{2Y_i}{Y_0}u_{il}\right), \qquad (13)$$

где температура T и макроскопическая скорость v_k связаны с термодинамическими силами Y_a равенствами

$$\frac{1}{Y_0} \equiv \frac{\partial \varepsilon}{\partial \sigma} = T\,,\ -\frac{Y_k}{Y_0} \equiv \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_k} = v_k.$$

Принимая во внимание формулы (13) и СП (10), получим нелинейные уравнения динамики для тензора деформаций Коши и плотностей аддитивных интегралов движения в замкнутом виде:

$$\dot{\zeta}_a = -\nabla_k \zeta_{ak}\,;$$
$$\dot{u}_{il} = -u_{lk}\nabla_i v_l - u_{il}\nabla_k v_l - v_l \nabla_l u_{ik}. \qquad (14)$$

Здесь плотности потоков в первом уравнении (14) имеют вид (13). Нетрудно показать, используя второе начало термодинамики (12) и уравнения (14), что наблюдается адиабатичность процессов в рассматриваемом главном приближении теории возмущений по малым пространственным градиентам конденсированной среды:

$$\dot{\sigma} = -\nabla_k\left(\sigma v_k\right).$$

УЧЕТ ДИССИПАТИВНЫХ ПРОЦЕССОВ. СТРУКТУРА КИНЕТИЧЕСКИХ КОЭФФИЦИЕНТОВ

Рассмотрим влияние диссипативных процессов на динамику твердого тела. Уравнения упругости в адиабатическом приближении можно переписать в эквивалентном виде:

$$\dot{\zeta}_a = -\nabla_k \zeta^0_{ak}\,;$$
$$\dot{u}_{il} = -u_{lk}\nabla_i v^0_l - u_{il}\nabla_k v^0_l - v^0_l \nabla_l u_{ik}\,, \qquad (15)$$

где скорость v^0_l и плотности потоков ζ^0_{ak}, определяемые формулой (13), являются реактивными потоками физических величин. С учетом сохранения формы уравнений (15) всюду в слагаемых с индексом (0) появятся дополнительные (диссипативные) члены, которые будем обозначать индексом (1). Таким образом, имеем:

$$\dot{u}_{il} = -u_{lk}\nabla_i\left(v^0_l + v^1_l\right) - u_{il}\nabla_k\left(v^0_l + v^1_l\right) - \left(v^0_l + v^1_l\right)\nabla_l u_{ik}\,;$$
$$\dot{\zeta}_a = -\nabla_k\left(\zeta^0_{ak} + \zeta^1_{ak}\right). \qquad (16)$$

Структуру диссипативных потоков v^1_l, ζ^1_{ak} найдем из требования положительности производства энтропии. Подставляя (16) в уравнения движения для плотности энтропии, согласно термодинамическому соотношению (12) получим:

$$\dot{\sigma} = -\nabla_k\left(j^0_{\sigma k} + j^1_{\sigma k}\right) + I. \qquad (17)$$

Здесь $j^1_{\sigma k}$ – диссипативный поток энтропии; I – производство энтропии

$$j^{(1)}_{\sigma k} \equiv Y_a \zeta^1_{ak} - 2\frac{\partial \omega}{\partial u_{kl}} u_{jl} v^1_j\,;$$
$$I \equiv \zeta^1_{ak}\nabla_k Y_a + v^1_l D_l\,, \qquad (18)$$

где введенная векторная величина

$$D_l \equiv \frac{\partial \omega}{\partial u_{ik}}\nabla_l u_{ik} - 2\nabla_k\left(\frac{\partial \omega}{\partial u_{ik}} u_{il}\right) \qquad (19)$$

пропорциональна малым пространственным неоднородностям. Диссипативные плотности потоков v^1_l, ζ^1_{ak} являются линейными функциями градиентов термодинамических сил $\nabla_l Y_b$ и вектора D_l :

$$\zeta^1_{ak} = K_{ak,bl}\nabla_l Y_b + K_{ak,l} D_l\,;$$
$$v^1_j = K_{j,bl}\nabla_l Y_b + K_{j,l} D_l\,,$$

где введенные величины $K_{ak,bl}$, $K_{ak,l}$, $K_{j,l}$ представляют собой обобщенные кинетические коэффициенты, которые удовлетворяют принципу Онзагера:

$$K_{ak,bl} = K_{bl,ak}\,,\quad K_{ak,l} = K_{l,ak}\,,\quad K_{j,l} = K_{l,j}$$

и приводят к положительности производства энтропии $I > 0$.

Рассмотрим случай, когда твердое тело находится вблизи состояния термодинамического равновесия в собственной системе отсчета, т.е.

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial u_{ij}} = 0\,,\ v^0_l = 0.$$

Тогда выражение для вектора D_l можен быть представлено в виде

$$D_l \equiv -\frac{1}{T}\overline{D}_l\,;\ \overline{D}_l = 2\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial u_{ik}\partial u_{jl}} u_{il}\nabla_k u_{jl}. \qquad (20)$$

В соответствии с формулами (20) диссипативные потоки $v^1_l, j^1_{\sigma k}, t^1_{ik}$ и условие положительности производства энтропии $I > 0$ записываются следующим образом:

$$v^1_l = -\xi^1_{lj}\nabla_j T - \frac{1}{T}K_{l,mj}\nabla_j v_m - \left(\xi^1_{ik} + \xi^2_{ik}\right)\overline{D}_k\,;$$
$$j^1_{\sigma k} = -\frac{1}{T}\left(\kappa_{kl} + T\xi^1_{kl}\right)\nabla_l T - \frac{1}{T^2}K_{0k,ml}\nabla_l v_m - \xi^1_{kl}\overline{D}_l\,;$$
$$t^1_{ik} = -\frac{1}{T^2}K_{ik,0l}\nabla_l T - \frac{1}{T}K_{ik,ml}\nabla_l v_m - \frac{1}{T}K_{ik,l}\overline{D}_l\,;$$
$$I = \frac{1}{T^2}\overline{\kappa}_{kl}\nabla_k T \nabla_l T + \frac{1}{T^3}K_{0k,ml}\nabla_l v_m \nabla_k T +$$

$$+\frac{1}{T^3}K_{ik,0l}\nabla_k v_i \nabla_l T+\frac{1}{T}\xi^1_{kl}\overline{D}_l\nabla_k T+\frac{1}{T}\xi^1_{\lambda j}\overline{D}_\lambda\nabla_j T+$$
$$+\frac{1}{T^2}K_{ik,ml}\nabla_k v_i\nabla_l v_m+\frac{1}{T^2}K_{ik,l}\overline{D}_l\nabla_k v_i+$$
$$+\frac{1}{T^2}K_{\lambda,mj}\overline{D}_\lambda\nabla_j v_m+\frac{1}{T}\bar{\xi}^2_{kl}\overline{D}_k\overline{D}_l>0, \qquad (21)$$

где $\bar{\kappa}_{kl}$ – тензор теплопроводности; ξ^1_{kl},ξ^2_{kl} – тензоры вязкоупругости. Здесь введены следующие обозначения:

$$\bar{\kappa}_{kl}=\frac{1}{T^2}K_{0k,0l}\,;\ \kappa_{kl}=\bar{\kappa}_{kl}-T\xi^1_{kl}\,;$$
$$\xi^1_{kl}=\frac{1}{T^2}K_{k,0l}\,;\quad \bar{\xi}^2_{kl}=\frac{1}{T}K_{k,l}\,;$$
$$\xi^2_{kl}=\bar{\xi}^2_{kl}-\xi^1_{kl}\,. \qquad (22)$$

Вязкость рассматриваемой системы в общем случае определяется тензором $K_{ik,ml}$. Отметим, что неоднородности скорости и малые деформации оказывают влияние на процесс теплопереноса.

В случае изотропного твердого тела нетривиальные обобщенные кинетические коэффициенты имеют более простой вид:

$$K_{0k,0l}=K_{00}\delta_{kl}\,,\ K_{0k,l}=K_0\delta_{kl}\,,\ K_{j,l}=K\delta_{j,l}\,; \qquad (23)$$
$$K_{ik,ml}=T\eta_1\left(\delta_{im}\delta_{kl}+\delta_{il}\delta_{km}-\frac{2}{3}\delta_{ik}\delta_{ml}\right)+T\eta_2\delta_{ik}\delta_{ml},$$

где η_1,η_2 – коэффициенты вязкости. Коэффициенты теплопроводности κ и вязкоупругости ξ_1,ξ_2 в соответствии с формулами (22) определяются равенствами:

$$\kappa=\bar{\kappa}-T\xi_1\,;\ \xi_1=\frac{1}{T^2}K_0\,;\ \xi_2=\bar{\xi}_2-\xi_1\,. \qquad (24)$$

В терминах этих кинетических коэффициентов диссипативные потоки $v^1_l, j^1_{\sigma k}, t^1_{ik}$ и условие положительности производства энтропии $I>0$ приобретут следующий вид:

$$v^1_l=-\xi_1\nabla_l T-(\xi_1+\xi_2)\overline{D}_l\,;$$
$$t^1_{ik}=-\eta_1\left(\nabla_k v_i+\nabla_i v_k-\frac{2}{3}\delta_{ik}\nabla_l v_l\right)-\eta_2\delta_{ik}\nabla_l v_l\,;$$
$$j^1_{\sigma k}=-\frac{1}{T}(\kappa+T\xi_1)\nabla_k T-\xi_1\overline{D}_k\,;$$
$$I=\frac{1}{T^2}\kappa(\nabla_k T)^2+\frac{1}{T}\xi_1\left(\nabla_k T+\overline{D}_k\right)^2+\frac{1}{T}\xi_2\overline{D}_k^2+$$
$$+\frac{1}{2T}\eta_1\left(\nabla_k v_i+\nabla_i v_k-\frac{2}{3}\delta_{ik}\nabla_l v_l\right)^2+$$
$$+\frac{1}{T}\eta_2(\nabla_l v_l)^2>0\,. \qquad (25)$$

Структура диссипативных потоков для изотропного твердого тела в уравнениях упругости содержит дополнительно помимо коэффициентов теплопроводности и вязкости еще два кинетических коэффициента вязкоупругости, которые отражают влияние упругих деформаций на релаксационные процессы. Учет этих эффектов в принципе позволяет объяснить и спрогнозировать макроскопические свойства и их связь со структурным поведением при достаточно сложных температурных, силовых и деформационных воздействиях.

В заключение авторы выносят благодарность члену-корреспонденту НАН Украины В.В. Слезову за постановку задачи и академику НАН Украины С.В. Пелетминскому за ценные замечания.

Работа выполнена при финансовой поддержке УНТЦ (проект № 2129).

ЛИТЕРАТУРА

1. I.E. Dzyaloshinsky, G.E. Volovick //*Annals of Physics*. 1980, v. 125, p. 67.
2. В. Лебедев, Е. Кац. *Динамика жидких кристаллов*. М.: «Наука», 1988, 144 с.
3. А. Исаев, М. Ковалевский, С. Пелетминский //*ЭЧАЯ*. 1996, т. 27, в. 2, с. 431.
4. А.И. Ахиезер, С.В. Пелетминский. *Методы статистической физики.* М.: «Наука», 1977, 368 с.
5. Ю.П. Вирченко, С.В. Пелетминский //*Проблемы физической кинетики и физики твердого тела.* Киев: «Наукова думка», 1990, с. 63–77.
6. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Теория упругости*. М.: «Наука», 1987, 246 с.

ДО ТЕОРІЇ РЕЛАКСАЦІЙНИХ ПРОЦЕСІВ У ТВЕРДОМУ ТІЛІ

М.Ю. Ковалевський, В.Т. Мацкевич, М.М. Чернишов

Запропоновано теорію пружності, яка як розділ механіки суцільного середовища грунтується на уявленні про спонтанно порушену трансляційну симетрію. Динамічною величиною у наборі параметрів скороченого опису, що пов'язана з таким порушенням симетрії, є тензор деформацій Коши, який можна виразити в термінах тензора дісторсії. Збудовано теорію пружності з урахуванням процесів дисипації. З'ясовано, що структура дисипативних потоків для ізотропного твердого тіла містить додатково, крім коефіцієнтів теплопровідності та в'язкісті, ще два кінетичних коефіцієнта в'язкопружності, які відображують вплив пружних деформацій на релаксаційні процеси.

TO THE THEORY OF RELAXATION PROCESSES IN SOLID STATE

M.Yu. Kovalevsky, V.T. Matskevych, N.N. Chernyshov

The elasticity theory, which is based on the idea of translational symmetry spontaneous breaking, is proposed. Cauchy deformation tensor is the dynamic quantity in the set of reduced description parameters, which is connected with such a symmetry breaking. This tensor can be introduced in terms of distorsion tensor. The elasticity theory with regard to the dissipation processes is constructed. It is clarified, that in the case of isotropic solid state structure of the dissipative flows contains additionally, besides coefficients of heat conduction and viscoucity, two kinetic coefficients of viscouelasticity, which are reflected the influence of elastic deformations on relaxation processes.