

ТЕРЕХОВ С.В.



15.09.1954

*Посвящается
всем коллегам, благодаря которым
автор состоялся, как ученый*

***ПОИСКИ
НАУЧНОЙ
ИСТИНЫ***

Том 3. Избранные научные труды. 2015-2020 годы

Донецк - 2020

УДК 531.3: 536:536.7: 539.0: 539.2
PACS 64.10.+h; 65; 66.10; 66.30.Qa; 66.30.Ny
ББК 22.96: 22.317
Т 35

Т 35 Терехов С.В. Поиски научной истины. Том 3. Избранные научные труды. 2015-2020 годы / С.В. Терехов – Донецк: Цифровая типография, 2020. – 262 с.

Терехов Сергей Владимирович родился 15.09.1954 г. в г. Донецке (УССР). В 1979 г. окончил с отличием физический факультет Донецкого государственного университета. 28 января 1987 г. защитил кандидатскую, а 29 мая 2008 г. – докторскую диссертации по специальности «Физика твердого тела». В 1996 г. присвоено ученое звание доцент кафедры «Высшая математика».

В монографии собраны избранные научные труды Терехова С.В., изданные им в период 2015-2020 г.г. В приведенных работах сохранен стиль и изложение текста оригинальных статей с небольшой коррекцией мелких неточностей. Содержание работ охватывает разнообразную тематику: термодинамика чистых веществ и их растворов; теория необратимых процессов; физика гиперпространства и синергетика. Терехову С.В. выдано одиннадцать авторских свидетельств СССР на изобретения.

Тереховым С.В. опубликованы такие книги: «Математический практикум для абитуриентов» (2006) «Моделирование тепловых и кинетических свойств реальных систем» (2007), «Введение в синергетику» (2009), «Фракталы и физика подобия» (2011), «Математический инструментарий для студентов» (в двух томах, 2011), «Физика нанобъектов» (2013), «Наноматериалы» (2016), «Математическая библиотечка студента-физика» (в трех томах, 2018), «Нанотехнологии» (2018) – и целый ряд научно-методических изданий.

Автор надеется, что монография окажется полезной всем, кто заинтересуется ее содержанием.

Содержание

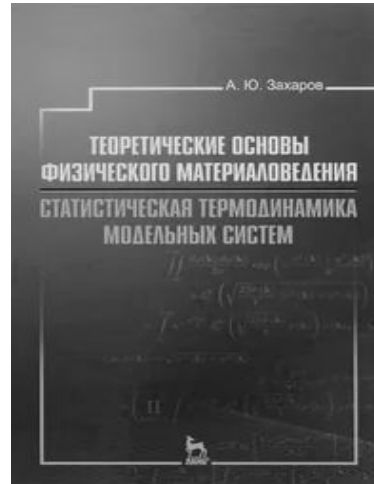
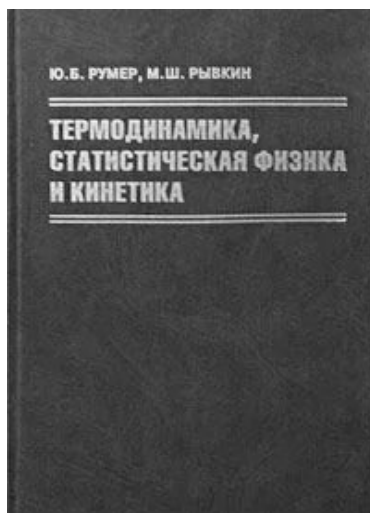
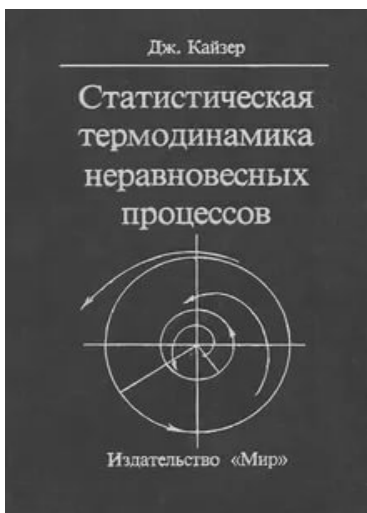
Стр.

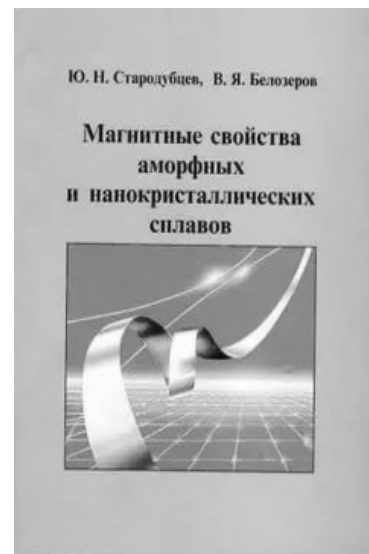
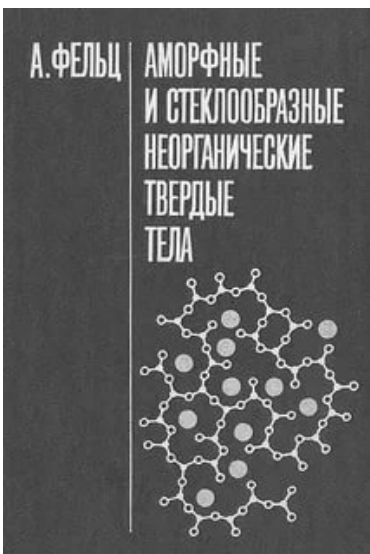
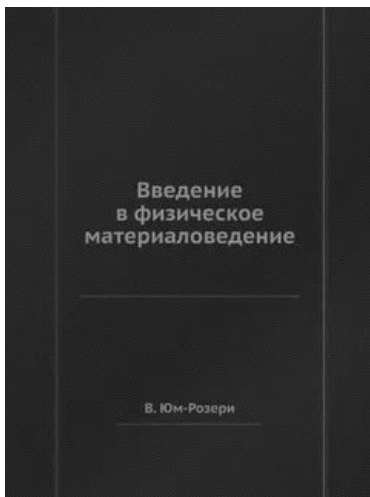
Том 3. 2015-2020 годы

39. **Терехов С.В.** Физико-геометрические характеристики гиперпространства. I. Обобщенная система Серре-Френе. Физический изоморфизм кватернионной алгебры Гамильтона..... 7
40. **Терехов С.В.** Физико-геометрические характеристики гиперпространства. II. Базисные кватернионы. Механика материальной точки..... 28
41. **Терехов С.В.** Физико-геометрические характеристики гиперпространства. III. Целлярный и субстанциональный операторы. Дефект кватернионной производной..... 43
42. **Терехов С.В.** Физико-геометрические характеристики гиперпространства. IV. Солитон Хасимото. Механическое движение целлы..... 59
43. **Терехов С.В.** Физико-геометрические характеристики гиперпространства. V. Поле гипердвойных кватернионов..... 76
44. **Терехов С.В.** Физико-геометрические характеристики гиперпространства. VI. Закон сохранения физической величины и закон изменения ее потока..... 90
45. **Локтионов И.К., Терехов С.В., Ткач В.И.** Теплоемкости вакансионной и корпускулярной подсистем конденсированной среды..... 100

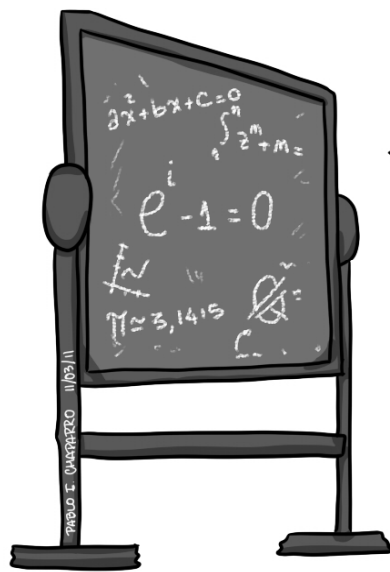
-
46. **Терехов С.В.**, Варюхин В.Н., Мельник Т.Н., Юрченко В.М. Термодинамическая концепция неравновесности. I. Функция неравновесности. Модели компенсации..... 115
47. **Терехов С.В.**, Варюхин В.Н., Мельник Т.Н., Петренко А.Г., Юрченко В.М. Термодинамическая концепция неравновесности. II. Состояния неравновесной системы и их эволюция..... 134
48. **Терехов С.В.**, Варюхин В.Н., Мельник Т.Н., Петренко А.Г., Юрченко В.М. Термодинамическая концепция неравновесности. III. Реакция системы. Возникновение иерархий..... 153
49. **Терехов С.В.** Термодинамическая модель размытого фазового перехода в металлическом стекле $Fe_{40}Ni_{40}P_{14}V_6$ 165
50. **Терехов С.В.**, Лимановский А.И. «Фаза пустоты» и размытый фазовый переход..... 175
51. **Терехов С.В.** Размытый фазовый переход в аморфном сплаве $Fe_{40}Ni_{40}P_{14}V_6$ термодинамика фаз и кинетика кристаллизации..... 188
52. **Терехов С.В.**, Запорожец В.Д. Границы термодинамической устойчивости аморфного материала. I. Взаимодействие фаз в приближении среднего поля..... 207
53. **Терехов С.В.** Границы термодинамической устойчивости аморфного материала. II. Субрегулярная совокупность фаз..... 219
54. **Терехов С.В.** Термические изменения состояния металлических стекол..... 229
-

55. *Приложение. Обложки книг*..... 245
 56. Научно-методические труды д.ф.-м.н. Терехова С.В.... 250





$$E = mc^2$$



$$x = \sqrt{4Dt}$$

$$E = h\nu$$

39. Физика и техника высоких давлений.

Донецк, 2015, т. 25, № 1-2, с. 5-19

PACS numbers: 02.10.De; 02.40.Hw; 03.30.+p

Терехов С.В.

**ФИЗИКО-ГЕОМЕТРИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ
ГИПЕРПРОСТРАНСТВА. I. ОБОБЩЕННАЯ СИСТЕМА
СЕРРЕ-ФРЕНЕ. ФИЗИЧЕСКИЙ ИЗОМОРФИЗМ
КВАТЕРНИОННОЙ АЛГЕБРЫ ГАМИЛЬТОНА**

Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина
ул. Р. Люксембург, 72, Донецк, 83114

Рукопись поступила в редакцию 5 мая 2014 года

Исследована система дифференциальных уравнений первого порядка Серре-Френе с учетом возможности поворота тройки базисных векторов вокруг вектора бинормали. Показано, что пренебрежение одной из геометрических характеристик (кривизной, кручением или поворотом) пространственной кривой приводит к осциллирующему характеру поведения соответствующего базисного вектора подвижной системы отсчета. Указано на необходимость различать геометрическую структуру траектории движения и физические свойства материальной частицы. Предложена модификация гиперкомплексной алгебры Гамильтона, отображающая поведение релятивистских объектов.

Ключевые слова: экстремаль, кривизна, кручение, кватернион, интервал между событиями

Досліджена система диференціальних рівнянь першого порядку Серре-Френе з урахуванням можливості повороту трійки базисних векторів навколо вектору бінормалі. Показано, що зневага однієї з геометричних характеристик (кривизною, крученням або поворотом) просторової кривої приводить до осцилюючого характеру поведінки відповідного базисного вектору рухливої системи відліку. Вказано на необхідність розрізняти геометричну структуру траєкторії руху і фізичні власти-

вості матеріальної частки. Запропонована модифікація гіперкомплексної алгебри Гамильтона, що відображає поведінку релятивістських об'єктів.

Ключові слова: екстремаль, кривизна, кручення, кватерніон, інтервал між подіями

1. ВВЕДЕНИЕ

В специализированных областях физики накоплен достаточно обширный массив теоретических и экспериментальных данных о различных физических явлениях и процессах. В частности, исследования нелинейных динамических и неравновесных термодинамических систем продемонстрировали существование универсальных закономерностей [1–4]. Поэтому моделирование общих характеристик масштабных уровней структурирования природы требует адекватного математического аппарата, позволяющего описывать разнообразные системы и процессы самоорганизации в них.

Одним из подходов к решению этой проблемы является применение *гиперкомплексного исчисления Гамильтона* [5–8], финслеровой [9] и фрактальной [10, 11] геометрии, а также других алгебраических и геометрических построений. Например, в работах [12–16] продемонстрирована возможность применения классических гиперструктур и псевдокватернионов к описанию электромагнитного поля и необратимых кинетических процессов. Однако построение последовательной физической теории гиперпространства с учетом результатов ранее предложенных теоретических построений требует поиска такого изоморфизма *алгебры Гамильтона*, который отображал бы всю совокупность данных.

Широкое использование теории гиперкомплексных функций сдерживается отсутствием дифференциального и интегрального исчислений кватернионов (например, правила вычисления гиперпроизводной от произведения двух и более кватер-

нионов; теории дифференциальных гипероператоров, вычисление неопределенных интегралов от гиперкомплексных функций и т.д.). Сложности в развитии теории связаны с некоммутативностью, неассоциативностью и изменением произведения гиперфункций при взятии операции комплексного сопряжения. Эти особенности алгебры кватернионов приводят, в частности, к необходимости вывода правила вычисления гиперпроизводной от произведения двух кватернионов.

Выбор материальным миром определенной алгебры и геометрии указывает на необходимость проведения анализа геометрических и физических характеристик физического гиперпространства с учетом *теоремы Гельмгольца* [17, 18] на основе системы дифференциальных уравнений первого порядка типа *Серре-Френе* [19] для базисных кватернионов с единичной нормой. Это позволит выяснить роль геометрии экстремали (траектории движения частицы в пространственно-временном континууме) в формировании физических свойств материальной точки.

2. ТРОЙКА БАЗИСНЫХ ВЕКТОРОВ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ КРИВОЙ

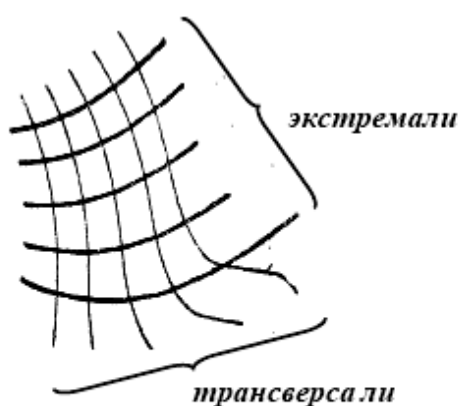


Рис. 1. Экстремали и трансверсали механического движения

Скалярные, векторные и тензорные поля формируют в пространстве потенциальный рельеф, по которому происходит движение материальных объектов. Его топографическая карта изображается в виде эквипотенциальных линий (трансверсалий [20], рис. 1). В евклидовом пространстве траектория движения точки (экстремаль, рис. 1) является линией, на которой действие достигает экстремального значения. Касательные векторы к экстремали

является линией, на которой действие достигает экстремального значения. Касательные векторы к экстремали

(касательный орт) и трансверсали (орт бинормали) определяют касательную плоскость к пространственной кривой. Вектор, который перпендикулярен к касательной плоскости и направлен в сторону вогнутости экстремальной кривой, называют нормалью. Сформулируем и докажем теорему о тройке векторов

$$\mathbf{A}(A_1, A_2, A_3), \mathbf{B}(B_1, B_2, B_3) \text{ и } \mathbf{C}(C_1, C_2, C_3)$$

(A_i, B_i и C_i ($i=1,2,3$)) – проекции соответствующих векторов на координатную ось i) на пространственной линии с естественной параметризацией, т.е. зависящих, например, от длины пространственной линии s .

Теорема 1. Пусть векторы $\mathbf{A}(s)$, $\mathbf{B}(s)$ и $\mathbf{C}(s)$ зависят от естественного параметра s и удовлетворяют системе линейных дифференциальных уравнений первого порядка вида

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{A}}{ds} = K_1\mathbf{B} - K_2\mathbf{C} \\ \frac{d\mathbf{B}}{ds} = K_3\mathbf{C} - K_1\mathbf{A} \\ \frac{d\mathbf{C}}{ds} = K_2\mathbf{A} - K_3\mathbf{B} \end{cases}, \quad (1)$$

здесь K_i ($i=1,2,3$) – постоянные действительные числа. Тогда:

а) система дифференциальных уравнений первого порядка (1) является *системой Серре-Френе* [3, с. 84; 19, с. 23–36; 21, с.190–191] при нулевом значении параметра K_2 ;

б) приращения векторов $\mathbf{A}(s)$, $\mathbf{B}(s)$ и $\mathbf{C}(s)$ удовлетворяют соотношению

$$K_3d\mathbf{A} + K_2d\mathbf{B} + K_1d\mathbf{C} = 0; \quad (2)$$

в) любая тройка взаимно перпендикулярных векторов ($\mathbf{A} \perp \mathbf{B}$, $\mathbf{B} \perp \mathbf{C}$ и $\mathbf{C} \perp \mathbf{A}$) является решением системы (1);

г) если базисный вектор не входит в соотношение (2) (например, для вектора \mathbf{A} число $K_3 = 0$), то этот вектор по параметру s определяется решением уравнения осцилляторного типа;

д) если один из векторов $\mathbf{A}(s)$, $\mathbf{B}(s)$ и $\mathbf{C}(s)$ выбрать в качестве основного, то другие векторы этой тройки можно выразить че-

рез основной вектор, его первую и вторую производные по параметру s ;

е) если любые два параметра в системе (1) равны нулю (например, $K_1 = K_2 = 0$), то один из векторов не зависит от параметра s (в примере – вектор $A(s)$), а два других вектора ($B(s)$ и $C(s)$) базисной тройки, подчиняются уравнению осцилляторного типа.

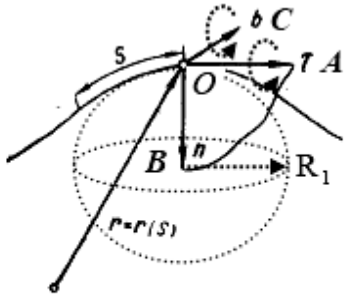


Рис. 2. Тройка подвижных векторов пространственной линии

Доказательство: а) Система уравнений (1) совпадает по виду с системой Серре-Френе при значении параметра $K_2 = 0$, если векторы $A(s)$, $B(s)$ и $C(s)$ являются ортами касательной τ , нормали n и бинормали b кривой s в заданной точке (рис. 2), т.е. образуют подвижную систему отсчета. Число K_1 ($K_1 = R_1^{-1}$, R_1 –

радиус сферы, которая имеет с линией одну общую точку) в модели Серре-Френе задает кривизну пространственной линии, а параметр K_3 – ее кручение, т.е. вращение касательной плоскости COA вокруг вектора A . Следовательно, параметр K_2 определяет второе кручение (поворот) линии при вращении плоскости COA вокруг вектора бинормали C . Пренебрежение вращением касательной плоскости вокруг вектора C (параметр $K_2 = 0$)

приводит к коллинеарности векторов $\frac{dA}{ds}$ и $\frac{dC}{ds}$, что является не-

обязательным условием. Другими словами, система уравнений Серре-Френе не определяет тройку базисных векторов единственным образом в отличие от системы (1).

б) Умножим первое равенство системы (1) на множитель $K_3 ds$, второе – на $K_2 ds$, а третье – на $K_1 ds$, затем сложим полученные уравнения, придем к соотношению (2).

в) Так как векторы $A(s)$, $B(s)$ и $C(s)$ взаимно перпендикулярные, то их можно связать между собой векторными произведениями $A = [B \times C]$; $B = [C \times A]$;

$$\mathbf{C} = [\mathbf{A} \times \mathbf{B}] = \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ A_1 & A_2 & A_3 \\ B_1 & B_2 & B_3 \end{vmatrix} = (A_2 B_3 - A_3 B_2) \mathbf{i} + \\ + (A_3 B_1 - A_1 B_3) \mathbf{j} + (A_1 B_2 - A_2 B_1) \mathbf{k} \quad (3)$$

здесь \mathbf{i} , \mathbf{j} и \mathbf{k} – орты декартовой системы координат, причем векторное произведение некоммукативно, т.е.

$$[\mathbf{A} \times \mathbf{B}] = -[\mathbf{B} \times \mathbf{A}]. \quad (4)$$

Дифференцируя векторные произведения по параметру s , учитывая уравнения системы (1) и равенство (4), получим

$$\frac{d\mathbf{A}}{ds} = \left[\frac{d\mathbf{B}}{ds} \times \mathbf{C} \right] + \left[\mathbf{B} \times \frac{d\mathbf{C}}{ds} \right] = -K_1 [\mathbf{A} \times \mathbf{C}] + K_2 [\mathbf{B} \times \mathbf{A}] = K_1 \mathbf{B} - K_2 \mathbf{C}; \\ \frac{d\mathbf{B}}{ds} = \left[\frac{d\mathbf{C}}{ds} \times \mathbf{A} \right] + \left[\mathbf{C} \times \frac{d\mathbf{A}}{ds} \right] = -K_3 [\mathbf{B} \times \mathbf{A}] + K_1 [\mathbf{C} \times \mathbf{B}] = K_3 \mathbf{C} - K_1 \mathbf{A}; \quad (5) \\ \frac{d\mathbf{C}}{ds} = \left[\frac{d\mathbf{A}}{ds} \times \mathbf{B} \right] + \left[\mathbf{A} \times \frac{d\mathbf{B}}{ds} \right] = -K_2 [\mathbf{C} \times \mathbf{B}] + K_3 [\mathbf{A} \times \mathbf{C}] = K_2 \mathbf{A} - K_3 \mathbf{B}.$$

2) Продифференцируем первое уравнение системы (1) по параметру s , с учетом двух других равенств этой системы найдем

$$\begin{cases} \frac{d^2 \mathbf{A}}{ds^2} = -(K_1^2 + K_2^2) \mathbf{A} + K_2 K_3 \mathbf{B} + K_1 K_3 \mathbf{C} \\ \frac{d\mathbf{A}}{ds} = K_1 \mathbf{B} - K_2 \mathbf{C} \end{cases} \quad (6)$$

Пусть базисный вектор $\mathbf{A}(s)$ не входит в соотношение (2), тогда параметр $K_3 = 0$. Из первого уравнения системы (6) видно, что при обнулении параметра K_3 основной вектор \mathbf{A} будет удовлетворять уравнению осцилляторного типа

$$\frac{d^2 \mathbf{A}}{ds^2} + \omega_{10}^2 \mathbf{A} = 0, \quad (7)$$

где частота колебаний $\omega_{10} = \sqrt{K_1^2 + K_2^2}$.

д) Общее решение системы (6) относительно векторов $\mathbf{B}(s)$ и $\mathbf{C}(s)$ ($K_3 \neq 0$) имеет вид (в качестве основного вектора базисной тройки выбран вектор $\mathbf{A}(s)$)

$$\mathbf{B} = \frac{K_2}{K_3 \omega^2} \frac{d^2 A}{ds^2} + \frac{K_1}{\omega^2} \frac{dA}{ds} + \frac{K_2}{K_3} A, \quad (8)$$

$$\mathbf{C} = \frac{K_1}{K_3 \omega^2} \frac{d^2 A}{ds^2} - \frac{K_2}{\omega^2} \frac{dA}{ds} + \frac{K_1}{K_3} A. \quad (9)$$

Формулы (8) и (9) показывают, что для введения системы отсчета на пространственной линии необходимо и достаточно знать естественную параметризацию одного вектора из базисной тройки. При выполнении равенства

$$\frac{K_2}{K_3} \frac{d^2 A}{ds^2} + K_1 \frac{dA}{ds} = 0 \quad (10)$$

$$\left(\frac{K_1}{K_3} \frac{d^2 A}{ds^2} - K_2 \frac{dA}{ds} = 0 \right) \quad (11)$$

происходит вырождение пространственной кривой в плоскую линию. Одновременное соблюдение условий (10) и (11) приводит к одномерному движению вдоль прямой, так как векторы \mathbf{B} и \mathbf{C} будут коллинеарные с вектором \mathbf{A} и сонаправленные с ним. Это возможно только тогда, когда базисные векторы не зависят от параметра s .

е) Пусть, например, параметры K_1 и K_2 равны нулю, тогда вектор \mathbf{A} не зависит от параметра s ($\frac{dA}{ds} = 0$), а векторы \mathbf{B} и \mathbf{C} не

связаны с вектором \mathbf{A} . В этом случае вектор \mathbf{A} сохраняет постоянное значение, а векторы \mathbf{B} и \mathbf{C} осциллируют вдоль пространственной линии с частотой $\omega = K_3$, согласно пункту 2).

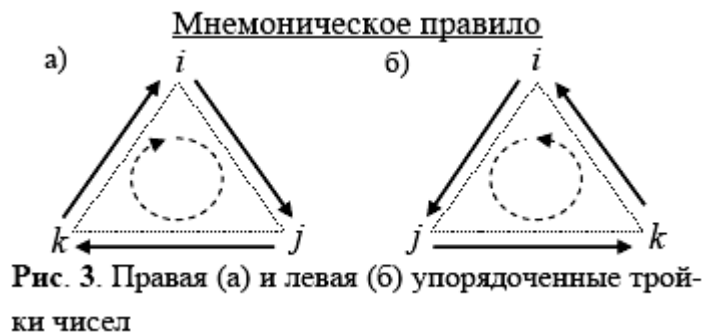
Изменение базисных векторов при смещении точки вдоль заданной пространственной кривой в зависимости от значений геометрических факторов указывает на необходимость разделять геометрические особенности траектории движения и физические свойства частицы. Для описания перемещения материальной частицы в пространственно-временном континууме введем в рассмотрение гиперкомплексные структуры, алгебра которых изоморфна алгебре Гамильтона.

3. КВАТЕРНИОНЫ ГАМИЛЬТОНА–ГИББСА

Рассмотрим гиперкомплексные структуры (кватернионы) вида $A = a + A_1i + A_2j + A_3k$, где a, A_n ($n=1,2,3$) – действительные числа. Исследуем изоморфизм алгебры Гамильтона, когда комплексные единицы i, j, k подчиняются правилам умножения, приведенным в таблице (более общий случай алгебры Клиффорда рассмотрен в работе [14]). Отметим, что обход чисел i, j, k осуществляется против часовой стрелки, т.е. они образуют левую упорядоченную тройку чисел (рис. 3б).

Таблица.
Правила умножения комплексных единиц

	i	j	k
i	1	$-k$	j
j	k	1	$-i$
k	$-j$	i	1



В векторной алгебре Гиббса такому правилу соответствует выбор левой тройки базисных векторов, поэтому запишем леворазориентированные кватернионы Гамильтона-Гиббса в скалярно-векторной форме:

$$A = a + \gamma A, \quad (12)$$

где $a = \text{Sc}(A)$ – скалярная, $A = \text{Ve}(A)$ – векторная части кватерниона A , γ – его «цвет» ($\gamma^2 = 1$). Комплексно-сопряженным кватернионом называется гиперкомплексная структура вида

$$A^* = a - \gamma A. \quad (13)$$

Отметим, что выражение (13) можно получить из (12) также путем замены вектора A на ему противоположный вектор $-A$, поэтому комплексно-сопряженный кватернион (13) будем называть зеркальным по векторной составляющей к кватерниону (12). Вещественно-сопряженный (или зеркальный по скалярной

компоненте) кватернион $*A = -a + \gamma A = -A^*$ отличается от комплексно-сопряженного кватерниона (13) только знаком. Кватернион вида $O = 0 + \gamma \theta$ назовем нулевым, а кватернион $E = 1 + \gamma \theta$ – единичным (θ – нуль-вектор). Две гиперкомплексные структуры $A = a + \gamma A$ и $B = b + \gamma B$ равны между собой, если $\begin{cases} a = b \\ A = B \end{cases}$.

Для гиперструктур вида (12) выполняются все арифметические действия:

1) сумма (разность) кватернионов $A = a + \gamma A$ и $B = b + \gamma B$ равна

$$C = c + \gamma C = A \pm B = a \pm b + \gamma(A \pm B),$$

следовательно,

$$A + A^* = A -^* A = 2a = 2 \text{Sc}(A),$$

$$A - A^* = A +^* A = 2\gamma A = 2\gamma \text{Ve}(A).$$

Если выполняется равенство $A - B = O$, то векторы A и B сонаправленные ($A \uparrow \uparrow B$) и имеют одинаковую длину ($|A| = |B|$), а при выполнении равенства $A - B^* = O$ равные по длине векторы A и B направлены в противоположные стороны ($A \uparrow \downarrow B$), т.е. для обоих равенств векторные части кватернионов являются коллинеарными ($A \parallel B$). В общем случае такие векторы связаны

между собой соотношением $B = \beta A$, причем $\begin{cases} A \uparrow \uparrow B, \beta > 0 \\ A \uparrow \downarrow B, \beta < 0 \end{cases}$ [18],

поэтому кватернионы, удовлетворяющие равенству $B = \beta A$, будем называть пропорциональными.

2) Произведение кватернионов $A = a + \gamma A$ и $B = b + \gamma B$ зависит от порядка следования сомножителей и равно:

левое

$$D_1 = d_1 + \gamma D_1 = BA = (b + \gamma B)(a + \gamma A) = ab + A \cdot B + \gamma\{aB + bA - [B \times A]\},$$

правое

$$D_2 = d_2 + \gamma D_2 = AB = (a + \gamma A)(b + \gamma B) = ab + A \cdot B + \gamma\{aB + bA - [A \times B]\}, \quad (14)$$

С учетом правила (4) левое и правое произведения кватернионов A и B отличаются друг от друга только знаком в послед-

нем слагаемом. Отметим, что произведение векторных частей кватернионов A и B выполняется по правилу

$$\gamma A \gamma B = A \cdot B - \gamma[A \times B], \quad (15)$$

где первое слагаемое задает скалярное (коммутативное)

$$A \cdot B = A_1 B_1 + A_2 B_2 + A_3 B_3, \quad A \cdot B = B \cdot A, \quad (16)$$

а второе – векторное (некоммутативное) произведение векторных частей кватернионов A и B (см. (3) и (4)). Используя правило (14), легко проверить, что произведение $AE = EA = A$. Произведение гиперкомплексных структур $A = a + \gamma A$ и $B = b + \gamma B$ равно единичному кватерниону при выполнении условий

$$AB = E : \begin{cases} ab + A \cdot B = 1 \\ aB + bA - [A \times B] = 0 \end{cases}.$$

Второе равенство этой системы (в силу того, что вектор $[A \times B]$ перпендикулярен плоскости, в которой лежат векторы A и B) выполняется только тогда, когда векторы A и B связаны между собой условием коллинеарности $aB + bA = 0$ или при выполнении равенств $A = B = 0$.

Произведение комплексно-сопряженных гиперструктур (12) и (13) равно квадрату нормы кватерниона A

$$AA^* = A^*A = a^2 - |A|^2 = \|A\|^2. \quad (17)$$

Если квадрат нормы положителен ($\|A\|^2 > 0$, норма кватерниона вещественна), то кватернион будем называть скалярно-подобным, в противном случае ($\|A\|^2 < 0$, норма кватерниона является комплексной величиной) – векторно-подобным. Кватернион с нулевой нормой ($\|A\| = 0$) назовем изохронным.

Теорема 2. Пусть дан неизохронный кватернион $A = a + \gamma A$, причём модули его скалярной и векторной частей

$\begin{cases} a \neq 0 \\ |A| \neq 0 \end{cases}$. Если его

норма вещественна, то вектор A имеет ограниченную длину.

Доказательство: Согласно определению (17), вещественная норма кватерниона $A = a + \gamma A$ равна

$$\|A\| = \sqrt{a^2 - |A|^2} = |a| \sqrt{1 - \left(\frac{|A|}{a}\right)^2} > 0.$$

Так как кватернион A скалярно-подобный, то выражение, стоящее под квадратным корнем, положительное. Следовательно, $|A| < |a|$, т.е. модуль векторной части кватерниона A ограничен.

Теорема 3. Пусть даны кватернионы $A = a + \gamma A$ и $B = b + \gamma B$. Их произведение $AB = A$ (или $BA = A$), если: **а)** при значениях параметров $\begin{cases} a \neq 0 \\ b \neq 1 \end{cases}$ кватернион A – изохронный, а норма кватерниона B равна $\|B\| = \sqrt{2b - 1}$; **б)** при значениях параметров $\begin{cases} a \neq 0 \\ b = 1 \end{cases}$

или $\begin{cases} a = 0 \\ b \neq 1 \end{cases}$ векторы A и B перпендикулярные.

Доказательство: **а)** Пусть при значениях параметров $\begin{cases} a \neq 0 \\ b \neq 1 \end{cases}$ произведение $AB = A$. Тогда выполняется система равенств

$$\begin{cases} ab + A \cdot B = a \\ aB + bA - [A \times B] = A \end{cases} \quad \text{или} \quad \begin{cases} a(b - 1) + A \cdot B = 0 \\ aB + (b - 1)A - [A \times B] = 0 \end{cases}$$

Умножим первое уравнение системы на число $a \neq 0$ и вычтем из результата второе уравнение, умноженное скалярно на вектор A , получим $(a^2 - |A|^2)(b - 1) = \|A\|^2(b - 1) = 0$. При значении параметра $b \neq 1$ норма кватерниона A равна нулю ($\|A\|^2 = 0$, $|A| = |a|$, $A = |a|e_A$, e_A – единичный вектор в направлении вектора A), т.е. кватернион A является изохронным. Умножим первое уравнение системы на число $b - 1 \neq 0$ и вычтем из результата второе уравнение, умноженное скалярно на вектор B , получим $a((b - 1)^2 - |B|^2) = 0$ ($|B| = |b - 1|$, $B = |b - 1|e_B$, e_B – единичный вектор в направлении вектора B). По условию теоремы число $a \neq 0$, тогда норма кватерниона B равна

$$\|B\|^2 = b^2 - |B|^2 = 2b - 1 \quad \text{или} \quad \|B\| = \sqrt{2b - 1}.$$

С другой стороны, с учетом найденных выражений для векто-

ров A и B первое уравнение преобразованной системы можно записать в виде $a(b-1)(1 \pm \cos \xi) = 0$ (ξ – угол между единичными векторами e_A и e_B). Из этого равенства следует, что единичные векторы e_A и e_B коллинеарные ($e_A \parallel e_B$), так как угол между ними будет равен 0 ($e_A \uparrow\uparrow e_B$) или π ($e_A \uparrow\downarrow e_B$).

б) Если параметры $\begin{cases} a \neq 0 \\ b = 1 \end{cases}$ или $\begin{cases} a = 0 \\ b \neq 1 \end{cases}$, то система уравнений сводится к одному равенству $A \cdot B = 0$, т.е. векторы A и B перпендикулярные ($A \perp B$).

Отметим, что Теорема 3 указывает на существование в гиперпространстве необычных кватернионов, отличных от единичной гиперструктуры $E=1+\gamma\theta$, произведение которых равно одному из них.

Операция комплексного сопряжения от произведения двух кватернионов приводит к выражению

$$(AB)^* = B^* A^*, \quad (18)$$

т.е. она приводит не только к комплексному сопряжению перемножаемых кватернионов, но и к перестановке местами сомножителей.

Произведение двух кватернионов Гиббса некоммутативно, поэтому их коммутатор отличен от нуля и равен

$$[A, B] = AB - BA = -2\gamma[A \times B], \quad (19)$$

при этом выполняются равенства

$$[A, B] = -[A^*, B] = -[A, B^*] = [A^*, B^*].$$

Антикоммутатор равен

$$\{A, B\} = AB + BA = 2(ab + A \cdot B + \gamma(aB + bA)) \quad (20)$$

и справедливы соотношения

$$\{A, B\} = (\{A^*, B^*\})^*; \quad \{A^*, B\} = (\{A, B^*\})^*.$$

Удвоенное произведение кватернионов A и B равно

$$2AB = [A, B] + \{A, B\}, \quad (21)$$

т.е. произведение двух кватернионов представляется в виде полусуммы их коммутатора и антикоммутатора. В случае комп-

лексно-сопряженных гиперструктур коммутатор равен нулю, а антикоммутатор – удвоенному значению квадрата нормы:

$$[A, A^*] = 0 \text{ и } \{A, A^*\} = 2\|A\|^2. \quad (22)$$

Произведение трех и более *кватернионов Гамильтона–Гиббса* неассоциативно, т.е. зависит от порядка умножения гиперструктур. В этой связи введем понятие коммутатора ассоциации (ассоциатор), который, например, для трех гиперкомплексных чисел равен

$$\begin{aligned} [(A, B, C)] &= (AB)C - A(BC) = 2\gamma\{[[A \times B] \times C] - [A \times [B \times C]]\} = \\ &= 2\gamma((A \cdot B)C - A(B \cdot C)) \end{aligned} \quad (23)$$

(использована формула [21, с. 20]:

$$[[A \times B] \times C] = (A \cdot C)B - A(B \cdot C),$$

и ассоциатор комплексного сопряжения (астратор), например,

$$\begin{aligned} \langle (A, B, C) \rangle &= (AB)C - (A^*(B^*C^*))^*; \\ \langle (A^*, B, C) \rangle &= (A^*B)C - (A(B^*C^*))^* \end{aligned} \quad (24)$$

и т.д. Выполнив две циклические перестановки кватернионов в формуле (23) и просуммировав все полученные ассоциаторы, находим

$$[(A, B, C)] + [(C, A, B)] + [(B, C, A)] = 0 \quad (25)$$

или

$$[[A \times B] \times C] + [[C \times A] \times B] + [[B \times C] \times A] = 0, \quad (26)$$

т.е. сумма двойных векторных произведений с циклической перестановкой векторов равна нулю.

3) Деление кватерниона $A = a + \gamma\mathcal{A}$ на неизохронный ($\|B\| \neq 0$) кватернион $B = b + \gamma\mathcal{B}$ выполняется по правилам [6]:

$$\text{левое частное} - \frac{A}{B} = \frac{B^*A}{B^*B} = \frac{B^*A}{\|B\|^2},$$

$$\text{правое частное} - \frac{A}{B} = \frac{AB^*}{BB^*} = \frac{AB^*}{\|B\|^2}.$$

Если коммутатор (19) $[A, B^*] = 2\gamma[A \times B] = 0$ ($A \parallel B$ – векторы A и B коллинеарные), то левое и правое частные равны между собой.

Таким образом, совместное использование алгебры *кватернионов Гамильтона* и *векторного исчисления Гиббса* порождает алгебру комплексных структур с новыми свойствами. Отличие этих кватернионов от множеств действительных и комплексных чисел состоит в том, что их произведение некоммутативно, неассоциативно и изменяется при выполнении над ним операции комплексного сопряжения, поэтому необходимо указывать порядок перемножения кватернионов и тип вычисляемого частного. Индикаторами этих свойств являются отличные от нуля коммутаторы, ассоциаторы и астраторы кватернионов. С учетом особенностей исследуемого изоморфизма *алгебр Гамильтона-Гиббса* рассмотрим движение частицы в гиперпространстве.

4. ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ЛОРЕНЦА

Гиперпространством будем называть скалярно-векторное $(1 + 3)$ – пространство гиперкомплексных структур вида (12). Положение математической точки в пространственно-временном континууме инерциальной системы отсчета будем задавать безразмерным кватернионом

$$r = \tau + \gamma r, \quad (27)$$

где $\tau = ct/l$, c и l – предельная скорость (например, скорость света в вакууме, скорость звука в среде и др.) и характерное значение длины (длина свободного пробега частицы, корреляционная длина и др.) для рассматриваемой задачи, t – время; $r = R(x, y, z)/l$, в выбранной системе отсчета $R(x, y, z)$ – радиус-вектор, определяющий положение точки с пространственными координатами x , y и z .

Произведение кватерниона (27) самого на себя равно гиперструктуре

$$rr = r^2 = \tau^2 + |r|^2 + 2\gamma(\tau r) = L^2 + 2\gamma(\tau r), \quad (28)$$

где $L = \sqrt{\tau^2 + |r|^2}$ – евклидово расстояние от точки гиперпространства до начала координат. Движение математической точ-

ки порождает мировую линию, на которой интервал между событиями s во времениподобной области [22, с. 17] гиперпространства определяется нормой кватерниона (27)

$$s^2 = \|r\|^2 = rr^* = r^*r = \tau^2 - |r|^2. \quad (29)$$

На пространственно-временной евклидовой плоскости $\tau O |r|$ формула (29) определяет равнобочную гиперболу, ветви которой вытянуты вдоль временной оси. Если ввести тригонометрические функции для гиперболы [23] (синус $\text{sh}\psi = \frac{e^\psi - e^{-\psi}}{2}$ и косинус $\text{ch}\psi = \frac{e^\psi + e^{-\psi}}{2}$), то в гиперболической полярной системе координат (ψ – полярный угол)

$$\begin{cases} \tau = s \cdot \text{ch} \psi \\ |r| = s \cdot \text{sh} \psi \end{cases} \quad (30)$$

равенство (29) превращается в гиперболическое тождество

$$\text{ch}^2 \psi - \text{sh}^2 \psi = 1.$$

Гиперболический поворот отвечает в евклидовом пространстве гомотетии (сжатию или растяжению) гиперболы к координатным осям [23], т.е. скейлинговому преобразованию гиперболы. Модуль векторной части гиперкомплексной структуры (28) за счет поворота на угол 45° координатных осей плоскости $\tau O |r|$ может быть приведен к норме (29). Таким образом, квадрат кватерниона положения (27) равен $r^2 = L^2 + \gamma(s^2 e_r)$, где e_r – единичный вектор в направлении вектора r . Следовательно, интервал между событиями s является таким же естественным параметром, как и евклидово расстояние L . Вещественность нормы кватерниона (28) приводит к ограниченности интервала $s \leq L$ (теорема 2).

Из формул (30) видно, что при равномерном прямолинейном движении скорость перемещения инерциальной системы отсчета определяется равенством

$$u = \frac{|r|}{\tau} = \frac{v}{c} = \text{th} \psi \left(\text{th} \psi = \frac{\text{sh} \psi}{\text{ch} \psi} \right), \quad (31)$$

$$\begin{cases} \tau_1 = \frac{\tau - u_0 |r|}{\sqrt{1 - u_0^2}} \\ |r_1| = \frac{|r| - u_0 \tau}{\sqrt{1 - u_0^2}} \end{cases} \quad (34)$$

Обратные преобразования Лоренца получают из равенств (34) путем замены скорости относительного движения u_0 на противоположное значение ($-u_0$):

$$\begin{cases} \tau = \frac{\tau_1 + u_0 |r_1|}{\sqrt{1 - u_0^2}} \\ |r| = \frac{|r_1| + u_0 \tau_1}{\sqrt{1 - u_0^2}} \end{cases} \quad (35)$$

Формулы (34) позволяют объяснить эффекты замедления времени и сокращения длины при скоростях движения, близких к скорости c [22, с. 22–26]. Из соотношений (35) следует связь между скоростью частицы u (31) в старой инерциальной системе и ее скоростью u_1 в новой инерциальной системе (формула преобразования скоростей [22, с. 26; 23, с. 96]):

$$u = \frac{u_1 + u_0}{1 + u_1 u_0} \quad (36)$$

Из формулы (36) видно, что при выполнении равенства $u_1 = 1$, скорость $u = 1$ вне зависимости от величины скорости относительного перемещения u_0 одной инерциальной системы по отношению к другой. Этот эффект связан с обращением в нуль интервала между событиями в обеих системах координат, т.е. точки, движущиеся со скоростью c , описываются изохронными кватернионами.

В гиперпространстве интервал между событиями s , определяемый формулой (29), является вещественным и естественным параметром мировой линии таким же, как и параметр длины пространственной линии при движении в трехмерном пространстве Евклида. Если на мировой линии выбрать начало от-

счета и положительное направление увеличения интервала между событиями (например, в сторону возрастания времени), то кватернион (27) $r(s)$ будет функцией интервала s , а его первые и вторые производные по этому параметру будут характеризовать геометрию мировой линии: кривизну, кручение, повороты и гомотетии. С физической точки зрения эти величины определяются скоростью и ускорением частицы, поэтому в следующей работе вычислим физико-геометрические характеристики частицы на мировой линии.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В евклидовом пространстве геометрический вид экстремали (траектории движения) формируют потенциальные поля. Они изменяют кривизну и кручения пространства, что при определенных условиях может привести к периодическим и связанным между собой изменениям векторов подвижной системы координат. Эволюционные уравнения содержат характеристики сопряженного пространства (первые производные базисных векторов по естественному параметру) к *пространству Евклида*. Пренебрежение одним из геометрических факторов приводит к частным случаям описания эволюции базисной тройки векторов, причем один из этих случаев был исследован в *модели Серре-Френе*.

Для описания перемещения частиц в пространственно-временном континууме предлагается применение физического изоморфизма алгебры *кватернионов Гамильтона* в сочетании с векторным *исчислением Гиббса*. Соединение неассоциативной, некоммутативной и зависящей от операции комплексного сопряжения *теории Гамильтона с векторным анализом Гиббса* существенно увеличивает возможности используемого математического аппарата для отображения физической сущности реального мира. В частности, предлагаемый подход описывает поведение релятивистских частиц без привлечения дополнитель-

ных гипотез и позволяет получить все соотношения *специальной теории относительности Эйнштейна*. Отметим, что на мировой линии координаты частицы, которая движется с предельной скоростью, описываются изохронным кватернионом положения. Таким образом, предлагаемое теоретическое построение можно использовать для исследования физико-геометрических свойств гиперпространства на базе установленных соотношений.

1. *Хакен Г.*, Синергетика. Иерархии неустойчивостей в самоорганизующихся системах и устройствах, Мир, Москва (1985).
2. *Хакен Г.*, Тайны природы. Синергетика: учение о взаимодействии, Мир, Москва (2003).
3. *Терехов С.В.*, Введение в синергетику, Цифровая типография, Донецк (2009).
4. *Терехов С.В.*, ФТВД **22**, № 1, 33 (2012).
5. *Синг Д.*, Классическая динамика, Физматгиз, Москва (1963).
6. *Girard P.R.*, Eur. J. Phys., № 5, 25 (1984).
7. *Yefremov A.P.*, Гиперкомплексные числа в геометрии и физике, № 1, 104 (2004).
8. *Vargas Jose G.*, Гиперкомплексные числа в геометрии и физике **7**, № 1 (13), 165 (2010).
9. *Гарасько Г.И.*, Начала финслеровой геометрии для физиков, ТЕТРУ, Москва (2009).
10. *Мандельброт Б.*, Фрактальная геометрия природы, Институт компьютерных исследований, Москва (2002).
11. *Терехов С.В.*, Фракталы и физика подобия, Цифровая типография, Донецк (2011).
12. *Kruglov S.I.*, Annales de la Fondation Louis de Broglie **27**, № 2, 343 (2002).
13. *Терехов С.В.*, Вісник Донецького університету. Сер. А: Природничі науки, № 2, 287 (2002).

14. Терехов С.В., Вестник Новгородского государственного университета. Серия: Технические науки, № 26, 56 (2004).
15. Терехов С.В., ФТВД **16**, № 2, 55 (2006).
16. Терехов С.В., Локтионов И.К., ФТВД **23**, № 4, 5 (2013).
17. Корн Г., Корн Т., Справочник по математике, Наука, Москва (1973).
18. Кочин Н.Е., Векторное исчисление и начала тензорного анализа, Наука, Москва (1965).
19. Блашке В., Введение в дифференциальную геометрию, Удмуртский университет, Ижевск (2000).
20. Веретенников В.Г., Синицын В.А., Метод переменного действия, ФИЗМАТЛИТ, Москва (2005).
21. Борисенко А.И., Тарапов И.Е., Векторный анализ и начала тензорного исчисления, Вища школа, Харьков (1986).
22. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М., Теоретическая физика. Т. II. Теория поля, Наука, Москва (1973).
23. Морс Ф.М., Фешбах Г., Методы теоретической физики, Т.1, ИИЛ, Москва (1958).

Terekhov S.V.

**PHYSICS-GEOMETRICAL DESCRIPTIONS OF HYPERSPACE.
I. SERRE-FREINET THE GENERALIZED SYSTEM.
PHYSICAL ISOMORPHISM OF HAMILTON ALGEBRA OF THE
QUATERNIONS**

Motion of particle along an extremal it is possible to describe with the use of three of vectors of movable frame of reference. The evolution of vectors with natural parametrization (beginning of counting out moves along the trajectory of motion and depends on distance to the point, chosen as beginning) is described by the system of differential equalizations of first-order. As permanent parameters curvature, twisting and turn of extremal, is included in these equalizations. An appeal in the zero of one of these parameters results in the system of equalizations of type of Serret-Freinet system and

periodic change of one of vectors of base triad. Such behavior of movable frame of reference represents geometrical properties of space, which are necessary to be distinguished from physical properties of material particle.

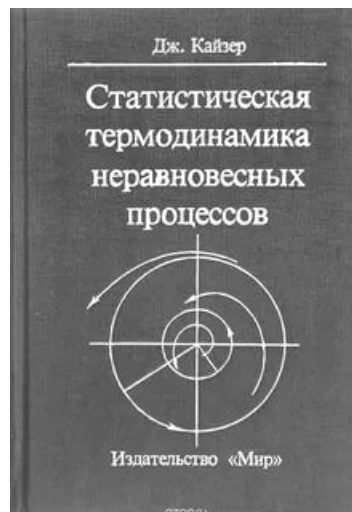
For description of the mechanical moving of particle in a spatiotemporal continuum it is suggested to use modification of Hamilton algebra in combination with Gibbs vectorial algebra. Algebra of such quaternions saves property of non-associativeness, non-commutativity and dependence on the operation of complex interface of hypercomplex algebra, but complemented by correlations of theory of the scalar and vectorial fields. Such approach allowed to describe behavior of relativist objects, leaning against constancy of interval between events in transition from one inertial reference frame in other without bringing in of additional hypotheses. The receipt of all formulas of the special theory of relativity shows possibility of the use of physical algebra for research of not only even but also speed-up motion. In next work the association of physical parameters of particle will be shown with geometrical descriptions of world line.

Fig. 1. Extremals and transversals of mechanical motion

Fig. 2. Three of movable vectors of spatial line

Fig. 3. Right (a) and left (б) well-organized three of numbers

Fig. 4. Old (G) and new (G_1) hyperbolic arctic systems of coordinates



40. Физика и техника высоких давлений.

Донецк, 2015, т. 25, № 3-4, с. 112-121

PACS numbers: 02.10.De; 02.40.Hw; 03.30.+p; 45.20.-d

Терехов С.В.

**ФИЗИКО-ГЕОМЕТРИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ
ГИПЕРПРОСТРАНСТВА. II. БАЗИСНЫЕ КВАТЕРНИОНЫ.
МЕХАНИКА МАТЕРИАЛЬНОЙ ЧАСТИЦЫ**

Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина
ул. Р. Люксембург, 72, Донецк, 83114

Рукопись поступила в редакцию 5 мая 2014 года

Исследованы геометрические характеристики мировой линии (экстремали) и установлены зависимости норм скоростей изменения базисных кватернионов от геометрических параметров траектории движения материальной точки в гиперпространстве. В рамках физической алгебры получены выражения для кватернионов импульса, силы и их моментов; показано, что они определяются касательным кватернионом при его естественной параметризации.

Ключевые слова: кватернион положения, мировая линия, энергия, импульс, сила

Досліджені геометричні характеристики світової лінії (екстремали) і встановлені залежності норм швидкостей зміни базисних кватерніонів від геометричних параметрів траєкторії руху матеріальної точки в гіперпросторі. У рамках фізичної алгебри отримані вирази для кватерніонів імпульсу, сили і їх моментів; показано, що вони визначаються дотичним кватерніоном при його природній параметризації.

Ключові слова: кватерніон положення, світова лінія, енергія, імпульс, сила

1. ВВЕДЕНИЕ

В работе [1] была рассмотрена физическая алгебра, возни-

кающая при совместном применении *алгебры гиперкомплексных структур Гамильтона и векторного исчисления Гиббса*. В рамках этой алгебры точка в гиперпространстве характеризуется кватернионом положения $r(s)$ ([1], формула (27)), нормой которого в $(1+3)$ -пространстве является интервал между событиями s ([1], формула (29)). Если события в гиперпространстве бесконечно близки, то изменение интервала между событиями в инерциальной системе отсчета [2, с. 16] равно норме бесконечно малого изменения кватерниона положения

$$ds = \|dr\| = \sqrt{d\tau^2 - |dr|^2} = d\tau\sqrt{1-u^2}, \quad (1)$$

где $\tau = ct/l$, c и l – предельная скорость и характерное значение длины для рассматриваемой задачи, t – время; $u = v/c$ – безразмерная скорость движения точки, $v = |v|$ – модуль размерной скорости движения точки в 3-мерном пространстве. Из формулы (1) видно, что изменение интервала между событиями:

- а) равно промежутку времени, если система координат покоится ($u = 0$) или движется со скоростью, значительно меньшей скорости c ($u \ll 1$);
- б) принадлежит области вещественных чисел (временеподобная область гиперпространства) тогда, когда скорость движения точки не превышает скорость c ($u < 1$, теорема 2 из [1]);
- в) равно нулю (кватернион положения гиперточки становится изохронным ($ds = \|dr\| = 0$)), если скорость перемещения точки достигает величины скорости c ($u > 1$);
- г) становится комплексной величиной (частица переходит в пространственноподобную область гиперпространства), если гиперточка перемещается со скоростью, превышающей скорость c ($u > 1$).

Бесконечно малое изменение евклидова расстояния L в гиперпространстве равно

$$dL = d\tau\sqrt{1+u^2}, \quad (2)$$

следовательно, величины (1) и (2) связаны между собой соотно-

шением

$$dL = ds \sqrt{\frac{1+u^2}{1-u^2}}, \quad (3)$$

т.е. интервал между событиями является такой же характеристикой мировой линии, как ее длина. При малых скоростях движения ($u \ll 1$) евклидово расстояние и интервал между событиями практически неразличимы. Рассмотрим поведение тройки базисных кватернионов инерциальной системы отсчета, если в качестве естественного параметра мировой линии выбрать интервал между событиями s .

2. ГЕОМЕТРИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ МИРОВОЙ ЛИНИИ

Исследуем свойства касательного кватерниона, так как он определяет сопряженные характеристики к кватерниону положения и два других базисных кватерниона гиперпространства. Касательный кватернион $\kappa = \kappa_0 + \gamma \mathbf{k}$ определяется нормированным значением бесконечно малого изменения кватерниона положения [1] и имеет вид

$$\kappa = \frac{dr}{\|dr\|} = \frac{d\tau}{ds} + \gamma \frac{dr}{ds} = \kappa_0 + \gamma \mathbf{k}, \quad (4)$$

причем его норма равна единице ($\|\kappa_0 + \gamma \mathbf{k}\|^2 = \kappa_0^2 - |\mathbf{k}|^2 = 1$). Гиперструктура $\kappa = \kappa_0 + \gamma \mathbf{k}$ лежит в пространстве, касательном к мировой линии, при этом ее скалярная и векторная части задаются формулами

$$\kappa_0 = \frac{1}{\sqrt{1-u^2}}, \quad \mathbf{k} = \kappa_0 \mathbf{u} \quad (5)$$

(\mathbf{k} – касательный вектор к мировой линии) и определяются безразмерной скоростью движения \mathbf{u} и ее модулем $u = |\mathbf{u}|$. Вектор \mathbf{k} будет ортом ($|\mathbf{k}| = 1$), если гиперточка будет двигаться по мировой линии со скоростью $u = \sqrt{2}/2$. Изменения времени $d\tau$ и радиус-вектора dr равны

$$d\tau = \kappa_0 ds, \quad dr = \kappa ds = \kappa_0 u ds \quad (6)$$

Согласно формулам (8) и (9) работы [1], базисные кватернионы нормали $n = n_0 + \gamma n$ и бинормали $b = b_0 + \gamma b$ задаются выражениями

$$n = \frac{K_2}{K_3 \omega^2} \frac{d^2 \kappa}{ds^2} + \frac{K_1}{\omega^2} \frac{d\kappa}{ds} + \frac{K_2}{K_3} \kappa, \quad (7)$$

$$b = \frac{K_1}{K_3 \omega^2} \frac{d^2 \kappa}{ds^2} - \frac{K_2}{\omega^2} \frac{d\kappa}{ds} + \frac{K_1}{K_3} \kappa, \quad (8)$$

где первая и вторая производные равны $\frac{d\kappa}{ds} = \frac{d\kappa_0}{ds} + \gamma \frac{d\kappa}{ds}$ и

$$\frac{d^2 \kappa}{ds^2} = \frac{d^2 \kappa_0}{ds^2} + \gamma \frac{d^2 \kappa}{ds^2}. \text{ В этих равенствах}$$

$$\frac{d\kappa_0}{ds} = \kappa_0^4 u w, \quad \frac{d\kappa}{ds} = \frac{d\kappa_0}{ds} \mathbf{u} + \kappa_0^2 \mathbf{w},$$

$$\frac{d^2 \kappa_0}{ds^2} = \kappa_0^5 \left(4\kappa_0^2 u^2 w^2 + w^2 + u \frac{dw}{d\tau} \right),$$

$$\frac{d^2 \kappa}{ds^2} = \frac{d^2 \kappa_0}{ds^2} \mathbf{u} + 3\kappa_0 \frac{d\kappa_0}{ds} \mathbf{w} + \kappa_0^3 \frac{dw}{d\tau},$$

$w = |\mathbf{w}| = \frac{l}{c^2} a$ – безразмерное ускорение, $a = \left| \frac{d\mathbf{v}}{dt} \right|$ – модуль раз-

мерного ускорения точки.

Норма кватерниона $\frac{d\kappa}{ds}$ равна

$$\left\| \frac{d\kappa}{ds} \right\| = \kappa_0^3 w \sqrt{4u^2 \sin^2 \left(\frac{\phi}{2} \right) - 1}, \quad (9)$$

где ϕ – угол между направлениями скорости и ускорения частицы. Она вещественна при выполнении неравенств совокупно-

$$\text{ти} \begin{cases} 2u \sin \left(\frac{\phi}{2} \right) \leq -1 \\ 2u \sin \left(\frac{\phi}{2} \right) \geq 1 \end{cases}. \text{ В силу ограниченности синуса скорость}$$

перемещения частицы должна принадлежать интервалу $[0,5; 1]$.

В этом случае подкоренное выражение (45) неотрицательно, а тригонометрическая функция $\sin\left(\frac{\phi}{2}\right)$ принимает значения из интервала $\left[-1; -\frac{1}{2u}\right]$ или $\left[\frac{1}{2u}; 1\right]$. При малых скоростях движения частицы ($0 \leq u < 0,5$) норма $\left\|\frac{d\kappa}{ds}\right\|$ является мнимой величиной.

Для исследования геометрии мировой линии предположим, что базисные кватернионы $\kappa = \kappa_0 + \gamma \mathbf{\kappa}$, $n = n_0 + \gamma \mathbf{n}$ и $b = b_0 + \gamma \mathbf{b}$ с единичными нормами ($\|\kappa\| = \|n\| = \|b\| = 1$) удовлетворяют системе дифференциальных уравнений вида (1) из [1]. Тогда квадраты норм естественных скоростей изменения кватернионов равны

$$\begin{cases} \left\|\frac{d\kappa}{ds}\right\|^2 = \omega_{10}^2 - \omega_1^2 \\ \left\|\frac{dn}{ds}\right\|^2 = \omega_{20}^2 - \omega_2^2 \\ \left\|\frac{db}{ds}\right\|^2 = \omega_{30}^2 - \omega_3^2 \end{cases}, \quad (10)$$

где частоты собственных колебаний ω_{i0} кватернионов

$$\kappa = \kappa_0 + \gamma \mathbf{\kappa}, \quad n = n_0 + \gamma \mathbf{n} \quad \text{и} \quad b = b_0 + \gamma \mathbf{b}$$

и частоты колебаний фазовых множителей ω_i равны

$$\begin{aligned} \omega_{10}^2 &= K_1^2 + K_2^2, & \omega_1^2 &= z_1 \text{Sc}(n\mathbf{b}^*), \\ \omega_{20}^2 &= K_1^2 + K_3^2, & \omega_2^2 &= z_2 \text{Sc}(b\mathbf{\kappa}^*), \\ \omega_{30}^2 &= K_2^2 + K_3^2, & \omega_3^2 &= z_3 \text{Sc}(\kappa\mathbf{n}^*), \end{aligned} \quad (11)$$

величины

$$\begin{cases} z_1 = 2K_1K_2 = \sqrt{\omega_{10}^4 - (\omega_{20}^2 - \omega_{30}^2)^2} \\ z_2 = 2K_1K_3 = \sqrt{\omega_{20}^4 - (\omega_{30}^2 - \omega_{10}^2)^2} \\ z_3 = 2K_2K_3 = \sqrt{\omega_{30}^4 - (\omega_{10}^2 - \omega_{20}^2)^2} \end{cases}, \quad (12)$$

а фазовые множители $Sc(nb^*) = n_0 b_0 - \mathbf{n} \cdot \mathbf{b}$, $Sc(b\kappa^*) = b_0 \kappa_0 - \mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\kappa}$, $Sc(\kappa n^*) = \kappa_0 n_0 - \boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{n}$.

Из формул (10)–(12) следует, что вид мировой линии и процесс движения по ней определяют:

- 1) собственные частоты колебаний базисных кватернионов ω_{i_0} и характеристики z_i , которые связаны с кривизной и кручениями пространства-времени;
- 2) фазовые множители (напр., $Sc(nb^*) = 0,5(nb^* + (nb^*)^*)$), обнуление которых приводит к тому, что нормы естественных скоростей изменения базисных кватернионов равны своим собственным частотам. Из формулы (12) следует, что аналогичная картина наблюдается и тогда, когда обнуляется один из геометрических факторов K_i (две из трех характеристик z_i обращаются в нуль).

Таким образом, физико-геометрические свойства мировой линии существенно зависят от изменения потенциального рельефа, по которому происходит движение материальных точек. Поэтому исследуем механику материальной точки в гиперкомплексном пространстве с учетом указанных особенностей их траекторий движения.

3. МЕХАНИКА МАТЕРИАЛЬНОЙ ТОЧКИ

Поступательное движение. Размерную скорость движения материальной точки (например, атома какого-либо вещества) в гиперпространстве вычислим по формуле (с учетом (5))

$$V = c \frac{dr}{ds} = \frac{c}{\sqrt{1-u^2}} + \gamma \frac{\mathbf{v}}{\sqrt{1-u^2}} = c\kappa_0(1 + \gamma \mathbf{u}) = c\boldsymbol{\kappa}, \quad (13)$$

а ее кватернион энергии-импульса (частица имеет массу покоя m_0) –

$$P = m_0 V = \frac{m_0 c}{\sqrt{1-u^2}} + \gamma \frac{m_0 \mathbf{v}}{\sqrt{1-u^2}} = \frac{E}{c} + \gamma \mathbf{P} = m_0 c \boldsymbol{\kappa} = P_0 \boldsymbol{\kappa}, \quad (14)$$

где $E = mc^2$ – энергия, $\mathbf{P} = m\mathbf{v}$ – импульс атома, а $P_0 = \frac{E_0}{c} = m_0 c$

– его импульс в состоянии покоя,

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1-u^2}} \quad (15)$$

– масса движущейся частицы. Норма кватерниона (14) равна

$$\|P\|^2 = PP^* = P^*P = \frac{E^2}{c^2} - |\mathbf{P}|^2 = P_0^2 \|\kappa\|^2 = P_0^2 = \frac{E_0^2}{c^2}. \quad (16)$$

При малых скоростях движения ($u \ll 1$, $m \approx m_0(1 + \frac{1}{2}u^2)$) энергия атома равна

$$E = mc^2 \approx E_0 + \frac{m_0 v^2}{2} = E_0 + K, \quad (17)$$

где $E_0 = m_0 c^2$ – энергия частицы в неподвижной системе отсчета, $K = \frac{m_0 v^2}{2}$ – кинетическая энергия атома. Отметим, что формулы (1), (15)–(17) совпадают с соответствующими формулами специальной теории относительности [2]. Разделив выражение

(14) на импульс в состоянии покоя $P_0 = \frac{E_0}{c} = m_0 c$, получим касательный кватернион κ , который запишем в физическом представлении

$$P = \frac{P}{P_0} = \kappa = \frac{E}{E_0} + \gamma \frac{\mathbf{P}}{m_0 c} = \varepsilon + \boldsymbol{\eta}, \quad (18)$$

где безразмерные величины энергии $\varepsilon = \kappa_0$ и импульса $\boldsymbol{\eta} = \frac{\mathbf{P}}{m_0 c} = \varepsilon \mathbf{u}$. Последнее равенство показывает, что импульс частицы определяет поток энергии.

Определим механический момент импульса частицы кватернионом $L = L_0 + \gamma \mathbf{L}$, причем векторная часть $\mathbf{L} = [\mathbf{r} \times \mathbf{p}]$. Из кватернионов положения (формула (27) работы [1]) и импульса (18) (с учетом формулы (19) работы [1] и равенства $[A, B^*] = -[A, B]$) можно создать две гиперкомплексные структуры механического момента импульса, при этом их скалярные части будут прямо пропорциональны фазам плоских волн, первая из которых распространяется в противоположном направлении по

отношению к радиус-вектору r , а вторая – вдоль его направления. Эти кватернионы имеют вид:

1) с фазовой скоростью волны, противоположно направленной к вектору r :

$$L_1 = \frac{1}{2}(r P + r^* P^*)^* = \text{Sc}(r P) - \frac{1}{2}[r, P] = \varepsilon\tau + \mathbf{p} \cdot \mathbf{r} + \gamma[\mathbf{r} \times \mathbf{p}]; \quad (19)$$

2) с фазовой скоростью волны, сонаправленной с вектором r :

$$L_2 = \frac{1}{2}(r P^* + r^* P) = \text{Sc}(r P^*) + \frac{1}{2}[r, P^*] = \varepsilon\tau - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r} + \gamma[\mathbf{r} \times \mathbf{p}], \quad (20)$$

Разница кватернионов (19) и (20) равна

$$\Delta L_{12} = L_1 - L_2 = 2\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}. \quad (21)$$

Обозначим через φ угол между радиус-вектором r и импульсом частицы p . Если этот угол принадлежит промежутку от $0 + 2\pi n$ (n – целое число, $r \uparrow\uparrow p$, $L = 0$) до $\pi + 2\pi n$ ($r \uparrow\downarrow p$, $L = 0$), то изменение кватернионного момента импульса ΔL_{12} принимает непрерывный ряд значений от $2|\mathbf{p}\|\mathbf{r}|$ до $-2|\mathbf{p}\|\mathbf{r}|$, а параллелограмм, построенный на векторах r и p , характеризуется положительной площадью ($|L| = |\mathbf{p}\|\mathbf{r}| \sin\varphi$, $\sin\varphi \geq 0$). Дальнейшее увеличение угла φ от $\pi + 2\pi n$ до $2\pi + 2\pi n$, порождает обратный переход значений ΔL_{12} от $-2|\mathbf{p}\|\mathbf{r}|$ до $2|\mathbf{p}\|\mathbf{r}|$, но площадь указанного параллелограмма будет отрицательной ($\sin\varphi \leq 0$), что указывает на существование запрещенных значений кватернионов (19) и (20). Таким образом, критический угол, при котором выражения (19) и (20) теряют физический смысл, равен

$$\varphi_c = 2\pi \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

Для этого значения угла φ векторы r и p коллинеарные и противоположно направленные, а механический момент импульса $L = [\mathbf{r} \times \mathbf{p}] = 0$. При значениях угла φ_{\perp} , равных

$$\varphi_{\perp} = 2\pi \left(n + \frac{1}{4} \right)$$

($|L| = |\mathbf{p} \parallel \mathbf{r}| = \max$), векторы \mathbf{r} и \mathbf{p} перпендикулярны друг к другу, а кватернионы (19) и (20) равны между собой.

Сила F , действующая на частицу в гиперпространстве, равна

$$F = \frac{c}{l} \frac{dP}{ds} = \frac{dE}{cdt\sqrt{1-u^2}} + \gamma \frac{dP}{dt\sqrt{1-u^2}} = \frac{dE}{cdt_0} + \gamma \frac{dP}{dt_0} = F_0 + \gamma F, \quad (22)$$

здесь $dt_0 = dt\sqrt{1-u^2}$ – временной промежуток в покоящейся системе отсчета. В консервативной системе (отсутствует скалярная сила $F_0 = 0$, ответственная за диссипацию энергии, т.е. механическая энергия сохраняется) действует только векторная сила, поэтому $F = \gamma F$. При малых скоростях движения ($u \ll 1$, $m \approx m_0$, $\mathbf{p} \approx m_0 \mathbf{v}$) вектор F принимает вид силы в теории Ньютона [4] $F \approx \frac{d\mathbf{p}}{dt} = m_0 \frac{d\mathbf{v}}{dt} = m_0 \mathbf{a}$. Обращение силы F в нуль приводит к сохранению импульса частицы P .

Момент силы, действующей на гиперточку, задается производной по интервалу между событиями от кватернионного момента импульса $L = L_0 + \gamma L$:

$$M = \frac{dL}{ds} = \frac{dL_0}{ds} + \gamma \frac{dL}{ds} = M_0 + \gamma M. \quad (23)$$

где векторный момент силы равен $M = [\mathbf{r} \times \mathbf{f}]$, а сила $\mathbf{f} = \frac{d\mathbf{p}}{ds}$.

Если скалярная часть кватерниона (23) равна нулю, то в процессе движения материальной точки в гиперпространстве сохраняется величина $L_{01} = \varepsilon\tau + \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}$ или $L_{02} = \varepsilon\tau - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}$. При обращении в нуль векторной составляющей кватерниона момента силы ($M = 0$) сохраняется механический момент импульса L частицы.

Рассмотрим случай, когда кватернионный момент импульса определен однозначно (угол φ между радиус-вектором \mathbf{r} и импульсом частицы \mathbf{p} равен $\varphi_{\perp} = 2\pi\left(n + \frac{1}{4}\right)$, а механический момент импульса достигает максимального значения

$$|L| = |\mathbf{p} \parallel \mathbf{r}| = \max$$

и задается формулой

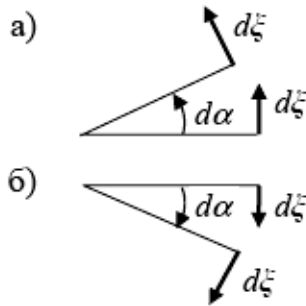
$$L = \varepsilon\tau + \gamma[\mathbf{r} \times \mathbf{p}], \quad (24)$$

т.е. при вращательном движении. Совпадение состояний, которые описываются формулами (19) и (20), указывает на вырожденность движения частицы с механическим моментом (24). Любое бесконечно малое отклонение угла φ от критического значения $\varphi_{\perp} = 2\pi\left(n + \frac{1}{4}\right)$ переводит частицу в одно из состояний

(19) или (20). Кроме того, согласно гипотезе де Бройля [3] о корпускулярно-волновом дуализме материальных объектов, можно записать ($\hbar = \frac{h}{2\pi}$, h – постоянная Планка), что

$$E = \hbar\omega, \quad \mathbf{P} = \hbar\mathbf{k}, \quad (25)$$

т.е. любому материальному объекту можно поставить в соответствие волну с определенной частотой ω и волновым вектором \mathbf{k} . Покажем, что равенства (25) возникают в случае пропорциональности изменений кватернионов положения (см. формулу (27) работы [1]) и вращения.



Вращение. Для описания угловых характеристик вращательного движения введем в рассмотрение ориентированный угол (см. рис.) с помощью кватерниона вращения

$$\Phi = \alpha + \gamma\xi \quad (26)$$

Рис. Левый (а) и правый (б) углы где α определяет величину угла, а ξ – вектор-ориентир угла. Вычислим размерную производную по интервалу между событиями от (26) (скорость вращения) в покоящейся системе отсчета:

$$\Omega = \frac{1}{l} \frac{d\Phi}{ds} = \frac{d\alpha}{cdt_0} + \gamma \frac{d\xi}{cdt_0} = \frac{\omega}{c} + \gamma\mathbf{k}, \quad (27)$$

здесь ω – циклическая частота вращения, \mathbf{k} – волновой вектор ($\omega = \frac{d\xi}{dt_0} = c\mathbf{k}$ – угловая скорость). Если кватернионы (14) и (27)

пропорциональны, то выполняются равенства (25)

$$P = \hbar\Omega. \quad (28)$$

Вращательные моменты скорости частицы равны

$$\begin{aligned} \Psi_1 &= \frac{l}{2}(r\Omega + r^*\Omega^*)^* = \omega t + \mathbf{k} \cdot \mathbf{r} + \gamma[\mathbf{r} \times \mathbf{k}] \\ \Psi_2 &= \frac{l}{2}(r\Omega^* + r^*\Omega) = \omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r} + \gamma[\mathbf{r} \times \mathbf{k}] \end{aligned}, \quad (29)$$

следовательно, механический и вращательный моменты связаны между собой равенством:

$$L_i = \hbar\Psi_i \quad (i=1, 2). \quad (30)$$

Формулы (28) и (30) показывают, что гипотезе де Бройля [3] соответствует пропорциональность бесконечно малых изменений кватернионов положения (см. формулу (27) работы [1]) и вращения (26), которые связаны между собой соотношением

$$dr = a d\Phi, \quad (31)$$

где $a = \frac{\hbar}{m_0 c l}$ – безразмерный коэффициент пропорциональности.

Из равенства (31) следует, что бесконечно малые изменения времени и радиус-вектора точки на мировой линии задаются равенствами

$$c dt_0 = a d\alpha, \quad dr = a d\xi. \quad (32)$$

Из формул (32) находим, что безразмерная скорость движения материальной точки

$$\mathbf{u} = \frac{\mathbf{v}}{c} = \frac{d\mathbf{r}}{c dt_0} = \frac{d\xi}{d\alpha}. \quad (33)$$

Из равенства (33) получим следующие соотношения:

$$\text{а) } \frac{d\alpha}{c dt_0} \mathbf{u} = \frac{d\xi}{c dt_0} \quad \text{или} \quad \frac{\omega}{c^2} \mathbf{v} = \mathbf{k}, \quad \text{т.е. } \mathbf{v} \parallel \mathbf{k};$$

$$\text{б) } \mathbf{v} d\alpha = \frac{d\alpha}{dt_0} d\mathbf{r} = \omega d\mathbf{r}, \quad \text{т.е. } \mathbf{v} \parallel d\mathbf{r}.$$

Скалярное произведение полученных формул а) и б) приводит к выражению $u^2 d\alpha = \mathbf{k} \cdot d\mathbf{r}$, интегрирование которого по любой замкнутой траектории движения порождает неравенство ($u^2 \leq 1$, n – целое число полных оборотов)

$$\oint \mathbf{k} \cdot d\mathbf{r} = \oint u^2 d\alpha \leq \oint d\alpha = 2\pi n. \quad (34)$$

При вращении по окружности линейная скорость представляется в виде суммы нормальной \mathbf{v}_n и тангенциальной \mathbf{v}_τ составляющих:

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{v}_n = v \cos \alpha \\ \mathbf{v}_\tau = v \sin \alpha \end{array} \right. . \text{ При малых углах } d\alpha \text{ эти скорости равны}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{v}_n \approx v \\ \mathbf{v}_\tau \approx v d\alpha \end{array} \right. . \text{ В пространстве скоростей эти формулы описы-$$

вают движение по спирали (самоподобной линии [5, с. 16]) к полюсу полярной системы координат или от него в зависимости от направления скорости v . Таким образом, пропорциональность кватернионов положения и вращения не только отображает корпускулярно-волновой дуализм частиц, но и указывает на спиральный тип движения частицы в пространстве скоростей.

Механическое поведение систем с большим числом частиц существенно отличается от перемещений одиночных атомов. Поэтому для описания их эволюции в следующей работе будет развит кватернионный дифференциальный анализ.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Естественная параметризация кватерниона положения материальной точки в гиперпространстве позволяет ввести в рассмотрение базисные кватернионы, причем их векторные части соответствуют базисной тройке *векторов Серре-Френе*. При малых скоростях движения точки по мировой линии норма скорости изменения касательного кватерниона имеет комплексный характер. Это указывает на то, что частота собственных осцилляций касательного кватерниона не превышает частоту колебаний, связанных с ним кватернионов нормали и бинормали. Физические характеристики материальной точки (скорость, импульс, момент импульса, сила и момент силы) определяются касательным кватернионом и его производными по интервалу

между событиями. Неоднозначность в определении момента импульса указывает на существование двух состояний, для которых радиус-вектор и импульс частицы являются коллинеарными, при этом их направления совпадают или противоположны. Превышение углом между радиус-вектором и импульсом частицы значения развернутого угла приводит к отрицательному значению модуля векторной части кватерниона момента импульса. Для описания непрямолинейного движения вводится кватернион вращения, пропорциональность которого кватерниону положения отвечает введению *гипотезы де Бройля*. Таким образом, физический изоморфизм *алгебры Гамильтона* верно отображает поведение реальных объектов.

В заключение отметим, что для изучения поведения достаточно большого числа частиц, суммарное поведение которых приводит к возникновению среды в том или ином агрегатном состоянии, требуется развитие гиперкомплексного дифференциального исчисления.

1. Терехов С.В., ФТВД **25**, № 1-2, 5 (2015).
2. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М., Теоретическая физика. Т. II. Теория поля, Наука, Москва (1973).
3. Гааз А., Волны материи и квантовая механика, Либроком, Москва (2010).
4. Геронимус Я.Л., Теоретическая механика (очерки об основных положениях), Наука, Москва (1973).
5. Терехов С.В., Фракталы и физика подобия, Цифровая типография, Донецк (2011).

Terekhov S.V.

**PHYSICS-GEOMETRICAL OF HYPERSPACE DESCRIPTION.
II. BASE QUATERNIONS. MECHANICS OF MATERIAL POINT**

Making of new conceptual ideas about physical essence of the material world is impossible without systematization and axiomatization of the before accumulated experimental and theoretical data. They demonstrate existence of similarity of the phenomena, universality of flowing processes, appearance high-quality of new parties under reaching threshold values by some managing parameters, identity of mathematical description of behavior of the different systems et cetera. In this connection there is a necessity of search of universal approach, being based on application of physical algebra and geometry, to description of the natural phenomena and processes. Because wrap-round algebra in relation to material and complex numbers is algebra of quaternions, then it is natural to carry out the search of physical isomorphism exactly of Hamilton theory taking into account vectorial Gibbs algebra.

Properties of tangent quaternion, qualificatory during natural parametrization two other base quaternion and the attended sizes to the quaternion of position of point in hyperspace are considered in the second work of this cycle. It is shown that the norm of natural speed of change of tangent quaternion depends on the rate of movement of point, her acceleration and corner between the indicated vectors. If the rate of movement of point does not exceed the half of maximum speed, then the indicated description is a complex size. It means that on a world line a tangent quaternion hesitates with less frequency, what frequency of joint vibrations of pair of quaternions of normal and binormal. At other rates of movement of point on a world line the norm of natural speed of change of tangent quaternion is material, and, consequently, the module of vectorial part of this quaternion is limited to the module of his scalar constituent. In other words, the module of acceleration of point does not exceed a threshold value, determined by the module of scalar part of quaternion of acceleration.

For description of unequal motion the quaternion of rotation, which describes the oriented corner, is entered. The proportion of

quaternions of position and rotation corresponds to introduction of de Broglie hypothesis, here scalar product of wavevector on the change of radius-vector, integrated on any reserved contour of phase space, does not exceed the integer value of complete turns (Born hypothesis).

Thus, application of physical algebra, leaning against the Hamilton and Gibbs calculations, allows without bringing in of additional hypotheses to describe the wide spectrum of the physical phenomena. However for research of the systems of many particles, designing behavior of different environments, development of hypercomplex differential analysis is needed, that it will be shown in next work.

A fig. Left (a) and right (б) corners



41. Физика и техника высоких давлений.

Донецк, 2016, т. 26, № 1-2, с. 106-117

PACS numbers: 02.10.De; 02.30.Tb; 45.20.-d; 45.50.-j

Терехов С.В.

**ФИЗИКО-ГЕОМЕТРИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ
ГИПЕРПРОСТРАНСТВА. III. ЦЕЛЛЯРНЫЙ И
СУБСТАНЦИОНАЛЬНЫЙ ОПЕРАТОРЫ.
ДЕФЕКТ КВАТЕРНИОННОЙ ПРОИЗВОДНОЙ**

Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина
ул. Р. Люксембург, 72, Донецк, 83114

Рукопись поступила в редакцию 5 мая 2014 года

Предложен дифференциальный кватернионный анализ и исследованы волновые свойства сплошных сред. Получено правило вычисления гиперкомплексной производной от произведения двух кватернионных функций и выражение для дефекта этой производной, обращение в нуль которого приводит к классическому выражению для производной от произведения двух вещественных или комплексных функций.

Ключевые слова: локальные свойства, частная производная, кватернион, волна

Запропонований диференціальний кватерніоний аналіз і досліджені хвильові властивості суцільних середовищ. Отримано правило обчислення гіперкомплексної похідної від добутку двох кватерніонних функцій і вираження для дефекту цієї похідної, перетворення на нуль якого призводить до класичного вираження для похідної від добутку двох дійсних або комплексних функцій.

Ключові слова: локальні властивості, приватна похідна, кватерніон, хвиля

1. ВВЕДЕНИЕ

Для исследования локальных свойств материального объ-

екта проводят его разбиение на малые целлы ([1, с. 103]; от лат. *cella* – внутренняя ограниченная часть помещения). При выводе уравнений эволюционных преобразований локальной области во времени используют частную (целлярную) производную (в безразмерных единицах [2]) $\frac{\partial}{\partial \tau}$, а в пространстве – оператор Гамильтона (оператор «набла»)

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} = \mathbf{i} \frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{j} \frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{k} \frac{\partial}{\partial z}. \quad (1)$$

Если центр масс целлы перемещается со скоростью \mathbf{u} , то в транспортных уравнениях применяют субстанциональную (материальную) производную [1, 3] $\frac{d}{d\tau} = \frac{\partial}{\partial \tau} + \mathbf{u} \cdot \nabla$, где второе слагаемое с математической точки зрения определяет производную по направлению скорости, а с физической – является конвективной составляющей движения. Следовательно, частные производные описывают изменения локальной области в случае неподвижного центра масс целлы, а полная производная – при его перемещении.

Сформулируем утверждение, связанное с оператором (1), которое понадобится для последующих рассуждений: для векторных функций пространственных координат \mathbf{A} и \mathbf{B} справедливо равенство

$$[[\mathbf{A} \times \nabla] \times \mathbf{B}] = [\mathbf{A} \times \text{rot } \mathbf{B}] + (\mathbf{A} \cdot \nabla) \mathbf{B} - \mathbf{A} \text{ div } \mathbf{B}, \quad (2)$$

здесь операции ротора (вихрь) $\text{rot } \mathbf{B} = [\nabla \times \mathbf{B}]$ и дивергенции (расходимость векторных линий) $\text{div } \mathbf{B} = \nabla \cdot \mathbf{B}$ (см. формулы (4) и (16) работы [2]). Отметим, что для любой скалярной ϕ и векторной \mathbf{B} функций справедливы соотношения:

$$\text{div}(\text{rot } \mathbf{B}) \equiv 0, \quad \text{rot}(\nabla \phi) \equiv 0 \quad \text{и} \quad \text{div}(\nabla \phi) = \Delta \phi$$

($\Delta = \nabla \cdot \nabla$ – оператор Лапласа).

Для изучения поведения локальных областей гиперпространства разработаем дифференциальный кватернионный анализ, т.е. математический аппарат, учитывающий неассоциатив-

ность, некоммутативность и изменение произведения кватернионов при комплексном сопряжении (формула (18) работы [2]).

2. ЦЕЛЛЯРНЫЙ И СУБСТАЦИОНАЛЬНЫЙ ОПЕРАТОРЫ

Целлярный оператор \diamond . Для характеристики изменений неподвижной целлы введем в рассмотрение гиперкомплексный 4-градиент (целлярный оператор; оператор «тетра»)

$$\diamond = \frac{\partial}{\partial \tau} + \gamma \nabla, \quad (3)$$

норма которого равна

$$\|\diamond\|^2 = \diamond \diamond^* = \diamond^* \diamond = \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} - \nabla \cdot \nabla = \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} - \Delta = -\square, \quad (4)$$

где \square – оператор Даламбера.

Производной вдоль кватерниона $A = a + \gamma A$ назовем произведение этого кватерниона с оператором «тетра»:

$$A \diamond = a \frac{\partial}{\partial \tau} + A \cdot \nabla + \gamma \left(a \nabla + A \frac{\partial}{\partial \tau} - [A \times \nabla] \right). \quad (5)$$

Тогда субстанциональной (материальной) производной является производная вдоль безразмерного кватерниона $1 + \gamma \mathbf{u}$, т.е. его произведение с целлярным оператором (3)

$$D = (1 + \gamma \mathbf{u}) \left(\frac{\partial}{\partial \tau} + \gamma \nabla \right) = \frac{d}{d\tau} + \gamma \frac{d}{dr}, \quad (6)$$

здесь $\frac{d}{d\tau} = \frac{\partial}{\partial \tau} + \mathbf{u} \cdot \nabla$ и $\frac{d}{dr} = \nabla + \mathbf{u} \frac{\partial}{\partial \tau} - [\mathbf{u} \times \nabla]$ – субстанциональные производные по времени и пространству, соответственно. Эти производные связаны между собой соотношениями

$$S_1 = \frac{d}{d\tau} - \mathbf{u} \cdot \frac{d}{dr} = (1 - u^2) \frac{\partial}{\partial \tau}, \quad (7)$$

$$S_2 = \frac{d}{d\tau} + \mathbf{u} \cdot \frac{d}{dr} = (1 + u^2) \frac{\partial}{\partial \tau} + 2(\mathbf{u} \cdot \nabla). \quad (8)$$

Оператор S_1 описывает гиперцеллярную производную, а оператор S_2 – гиперсубстанциональную производную по времени для частицы, которая движется со скоростью \mathbf{u} ; для неподвижной

частицы операторы S_1 и S_2 совпадают и равны частной производной по времени.

Перепишем субстанциональный оператор (6) в виде

$$D = \diamond + \mathfrak{K}, \quad (9)$$

где оператор перемещения целлы $\mathfrak{K} = \gamma \mathbf{u} \diamond = \mathbf{u} \cdot \nabla + \gamma \left(\mathbf{u} \frac{\partial}{\partial \tau} - [\mathbf{u} \times \nabla] \right)$

описывает конвективную составляющую движения.

Область гипераналитичности. Функция Лагранжа. Область, в которой для гиперкомплексной функции

$$F = f(\tau, \mathbf{r}) + \gamma F(\tau, \mathbf{r})$$

выполняются равенства

$$\diamond F = 0: \begin{cases} \frac{\partial f}{\partial \tau} + \operatorname{div} \mathbf{F} = 0 \\ \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \tau} + \operatorname{grad} f - \operatorname{rot} \mathbf{F} = 0 \end{cases}, \quad (10)$$

назовем областью гипераналитичности (гиперрегулярности) кватернионной функции F . С математической точки зрения первое уравнение системы (10) показывает, что в выделенной целле расходимость векторного поля \mathbf{F} противоположна по знаку скорости изменения скалярной составляющей f кватернионной функции F . Для интерпретации второго уравнения системы (10) обозначим целлярную производную $\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \tau} = \mathbf{X}$, тогда второе уравне-

ние системы (10) отображает *теорему Гельмгольца* [4, с. 177–178; 5, с. 209–220; 6, с. 59] ($\operatorname{div} \mathbf{F} = 0$) с другим выбором вида скалярного потенциала f (например, в работе [6, с. 59] скалярный потенциал f выбран в виде $\operatorname{div} \mathbf{W} = -f$, а в данной работе $\operatorname{div} \mathbf{W} = f$): $\mathbf{X} = -\nabla f + \operatorname{rot} \mathbf{F}$.

Физическая интерпретация системы равенств (10) состоит в следующем: если векторная часть кватерниона F описывает поток его скалярной составляющей ($\mathbf{F} = f \mathbf{u} = \alpha \nabla f$, α – кинетический коэффициент), то первое уравнение системы (10) описывает локальный закон сохранения величины f (кинетический

закон), при этом второе уравнение задает эволюцию потока во времени (т.е. течение) и является динамическим законом. Для полевых переменных первое уравнение системы (10) описывает калибровку Лоренца (см., напр., [6]), а второе – отсутствие внешних сил и определение внутренних локальных сил. Если же правые части уравнений системы (10) будут отличными от нуля, то первое из них описывает эволюцию скалярной компоненты f кватернионной функции F при наличии источников (или стоков) величины f , а второе – обобщение *теоремы Гельмгольца* на случай нестационарного векторного поля F при наличии внешних сил. Таким образом, использование *кватернионной алгебры Гамильтона* в сочетании с *векторной алгеброй Гиббса* позволяет объединить кинетический и динамический аспекты движения целлы. Другими словами, система уравнений (10) отображает дуалистическое единство необратимости и обратимости механического перемещения целлы.

Используя соотношения теории поля [7], легко показать, что система уравнений (10) преобразовывается к виду

$$\begin{cases} \square f(\tau, \mathbf{r}) = 0 \\ \square F(\tau, \mathbf{r}) + 2 \operatorname{rot}(\operatorname{rot} F) = 0 \end{cases} \quad (11)$$

где первое уравнение системы (11) описывает продольную, а второе – поперечную волну [6]. В кватернионном виде система (11) записывается в виде $\diamond^*(\diamond F) = 0$. Из-за неассоциативности кватернионной алгебры это уравнение отличается от уравнения, гиперкомплексная форма которого имеет вид уравнения Даламбера $\square F = (\diamond^* \diamond)F = 0$ (оно описывает распространение волны, которая движется с предельной скоростью c [6, с. 100]). Эти уравнения совпадают при выполнении равенства $\operatorname{rot}(\operatorname{rot} F) = 0$, общее решение которого можно записать, например, в виде $\operatorname{rot} F = \nabla f$ (случай стационарного векторного поля F или отсутствия локальной силы X , так как целлярная производная

$\frac{\partial F}{\partial \tau} = X = -\nabla f + \text{rot} F = 0$) в силу выполнения очевидного равенства $\text{rot}(\nabla f) \equiv 0$. Следовательно, при нарушении равенства $\text{rot}(\text{rot} F) = 0$ поперечная волна с предельной скоростью перемещения c превращается в волну с уравнением распространения, соответствующим второму уравнению (11).

Процесс движения в гиперпространстве может сопровождаться сохранением каких-либо кватернионных функций. Поэтому сформулируем и докажем теорему для таких функций, а также выясним условия, при которых они остаются неизменными.

Теорема 5. Если целла является областью гипераналитичности функции F , то условием сохранения функция F ($DF=0$) при движении в гиперпространстве является компланарность векторов u , F и $\text{rot} F$.

Доказательство: В силу того, что целла является областью гипераналитичности функции F , то выполняются соотношения системы (10), т.е. $\diamond F = 0$. С учетом равенства (9) кватернионная функция F сохраняется при движении в гиперпространстве ($DF=0$), если выполняется условие $\Re F = 0$. Использование соотношений системы (10) приводит к равенству

$$(u \cdot \nabla)F - u \text{div} F = 0. \quad (12)$$

Используя равенство (2), перепишем (12) в виде

$$[[u \times \nabla] \times F] - [u \times \text{rot} F] = 0.$$

Умножив это соотношение скалярно на вектор F , получим выражение $F \cdot [u \times \text{rot} F] = 0$, которое указывает на компланарность векторов F , u и $\text{rot} F$. Следовательно, гиперрегулярная кватернионная функция F сохраняется при движении целлы в гиперпространстве, если векторы F , u и $\text{rot} F$ лежат в одной или параллельных плоскостях.

Например, для кватерниона энергии-импульса (см. формулу (14) работы [7]) уравнения (10) принимают вид

$$\diamond P = 0: \begin{cases} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \tau} + \operatorname{div} \mathbf{p} = 0 \\ \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \tau} + \operatorname{grad} \varepsilon - \operatorname{rot} \mathbf{p} = 0 \end{cases} . \quad (13)$$

При выполнении условия (12) движение целлы в гиперпространстве происходит так, что сохраняется кватернион энергии-импульса. Первое уравнение системы (13) описывает локальный закон сохранения массы. Второе уравнение (13) с учетом *теоремы Гельмгольца* ($\operatorname{div} \mathbf{A} = 0$)

$$\frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \tau} = -\nabla U + \operatorname{rot} \mathbf{A} \quad (14)$$

(U – потенциальная энергия, \mathbf{A} – потенциал векторного поля) преобразуем к виду

$$\operatorname{grad} \Lambda - \operatorname{rot} \mathbf{\Pi} = 0, \quad (15)$$

здесь $\Lambda = \varepsilon - U$ – *функция Лагранжа*, $\mathbf{\Pi} = \mathbf{p} - \mathbf{A}$ – импульс движущейся частицы с учетом потенциала векторного поля. Если потенциальная энергия U не зависит явно от времени, то первое уравнение системы (13) запишется в виде

$$\frac{\partial \Lambda}{\partial \tau} + \operatorname{div} \mathbf{\Pi} = 0. \quad (16)$$

Таким образом, *функция Лагранжа* будет удовлетворять системе уравнений

$$\begin{cases} \frac{\partial \Lambda}{\partial \tau} + \operatorname{div} \mathbf{\Pi} = 0 \\ \operatorname{grad} \Lambda - \operatorname{rot} \mathbf{\Pi} = 0 \end{cases} . \quad (17)$$

Если импульс частицы-поля $\mathbf{\Pi}$ является потоком лагранжиана, то первое уравнение системы (17) отображает локальное сохранение *функции Лагранжа*. Второе уравнение системы (17) эквивалентно равенству $\operatorname{div}(\operatorname{grad} \Lambda) = \Delta \Lambda = 0$ ($\operatorname{div}(\operatorname{rot} \mathbf{\Pi}) \equiv 0$) или $\operatorname{rot}(\operatorname{rot} \mathbf{\Pi}) = 0$ ($\operatorname{rot}(\operatorname{grad} \Lambda) \equiv 0$). Первое из этих равенств отображает в *пространстве Евклида* фрактальный характер распределения *энергии Лагранжа* [8, с. 38; 9, с. 142–148], а второе – волну импульса частицы-поля $\mathbf{\Pi}$, которая распространяется

в пространстве-времени с предельной скоростью c (см. формулу (11)).

Собственные и зеркальные состояния целлярного оператора «тетра» \diamond . Собственные состояния оператора \diamond удовлетворяют уравнению $(G = g(\tau, \mathbf{r}) + \gamma \mathbf{G}(\tau, \mathbf{r}) - \text{собственная гиперфункция}, k_1 - \text{постоянные собственные значения, принадлежащие множеству действительных чисел})$

$$\diamond G = k_1 G . \quad (18)$$

Введение нового кватерниона $G = F \exp(k_1 \tau)$, приводит уравнение (18) к системе уравнений (10). Следовательно, собственными состояниями целлярного оператора являются затухающие ($k_1 < 0$) или нарастающие ($k_1 > 0$) во времени периодические движения в виде продольных и поперечных волн.

Зеркальные состояния оператора \diamond удовлетворяют уравнению (G^* – кватернион, комплексно-сопряженный к гиперструктуре G , $k_2 - \text{постоянные собственные значения, принадлежащие множеству действительных чисел})$

$$\diamond G = k_2 G^* . \quad (19)$$

Введение замен $g = f \exp(k_2 \tau)$ и $\mathbf{G} = \mathbf{F} \exp(-k_2 \tau)$, приводит уравнение (19) к виду

$$\diamond F = 0 : \begin{cases} \frac{\partial f}{\partial \tau} \exp(2k_2 \tau) + \text{div } \mathbf{F} = 0 \\ \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \tau} - \text{rot } \mathbf{F} + \exp(2k_2 \tau) \nabla f = 0 \end{cases} . \quad (20)$$

Выполнение действий, которые применялись при выводе формул системы (11), приводит к неоднородным уравнениям

$$\square f = 2k_2 \frac{\partial f}{\partial \tau} , \quad (21)$$

$$\square \mathbf{F} = -2 \text{rot}(\text{rot } \mathbf{F}) + (2k_2 - 1) \exp(2k_2 \tau) \frac{\partial \nabla f}{\partial \tau} . \quad (22)$$

Правая часть уравнения (21) описывает появление трения [6, с. 135] или «заряда» с плотностью [6, с. 200]

$$\kappa = -\frac{k_2}{2\pi} \frac{\partial f}{\partial t}, \quad (23)$$

а правая часть уравнения (22) определяет «ток» с плотностью

$$\mathbf{J} = -\frac{c}{2\pi} \text{rot}(\text{rot } \mathbf{F}) + \frac{2k_2 - 1}{4\pi} \exp(2k_2\tau) \frac{\partial \nabla f}{\partial t}. \quad (24)$$

Отметим, что собственные и зеркальные состояния целлярного оператора \diamond являются коллинеарными состояниями по их векторной составляющей.

Таким образом, действие целлярного оператора на собственную кватернионную функцию приводит к возникновению однородных волн (собственные движения). Если его действие порождает зеркальную гиперструктуру, то возникают неоднородные периодические перемещения с образованием «зарядов» и «токов» (зеркальные состояния).

Иерархия периодических движений. Применив действия, которые использовались при выводе формул (11), к уравнению $\diamond G = V^*$ (кватернион $V^* = v - \gamma V$), получим уравнения неоднородных продольных и поперечных волн

$$\square g = -z, \quad (25)$$

$$\square \mathbf{G} + 2 \text{rot}(\text{rot } \mathbf{G}) = -\mathbf{Z}, \quad (26)$$

где величины $z = \frac{\partial v}{\partial \tau} + \text{div } V$ и $-\mathbf{Z} = \frac{\partial V}{\partial \tau} + \nabla v + \text{rot } V$. Повторение

описанной процедуры для величин z и \mathbf{Z} приводит к волновым уравнениям для функций v и V :

$$\square v = -y, \quad (27)$$

$$\square V + 2 \text{rot}(\text{rot } V) = -Y, \quad (28)$$

где $y = \frac{\partial z}{\partial \tau} + \text{div } \mathbf{Z}$ и $-Y = \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial \tau} + \nabla z - \text{rot } \mathbf{Z}$. Дальнейшее применение

описанной процедуры порождает волны величин z и \mathbf{Z} , т.е. предлагаемая модель описывает мультимасштабное возникновение волн с различными модами. Этот сценарий развития событий в неравновесной системе возможно отвечает за появле-

ние аномального диффузионного потока и турбулентного течения.

Построение стохастико-детерминированной иерархии волн может закончиться на любой четной стадии эволюции при (само-) зацикливании развивающегося процесса. Рассмотрим, например, самозамыкание второй стадии эволюции на первоначальную ($z = \lambda g$ и $\mathbf{Z} = \lambda \mathbf{G}$ (коллинеарность векторов), λ – коэффициент зацикливания): состояние системы описывают уравнения типа Клейна-Гордона как для исходных характеристик

$$\square g = -\lambda g, \quad \square \mathbf{G} + \text{rot}(\text{rot } \mathbf{G}) = -\lambda \mathbf{G}, \quad (29)$$

так и для скоростей их производства (утилизации) и компенсационных течений:

$$\square v = -\lambda v, \quad \square V + \text{rot}(\text{rot } V) = -\lambda V. \quad (30)$$

Состояние неравновесной области описывается системой из четырех уравнений

$$\begin{cases} \frac{\partial g}{\partial \tau} + \text{div } \mathbf{G} = v \\ \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \tau} - \text{rot } \mathbf{G} + \nabla g = -V \\ \frac{\partial v}{\partial \tau} + \text{div } V = \lambda g \\ \frac{\partial V}{\partial \tau} + \text{rot } V + \nabla v = -\lambda \mathbf{G} \end{cases}, \quad (31)$$

которая описывает возникновение независимых *поперечных* и *продольных волн Клейна-Гордона*, т.е. самоорганизующийся самозацикленный процесс. Возникновение волновых движений неизбежно должно приводить к формированию новых структур, вид которых зависит от граничных условий.

Исследование перестроечных процессов проводится на основе кинетико-динамических уравнений, вывод которых требует развития гиперкомплексного дифференциального анализа, в частности, для вывода правила дифференцирования произведения кватернионных функций.

3. ПРАВИЛО ДИФЕРЕНЦИРОВАНИЯ ПРОИЗВЕДЕНИЯ КВАТЕРНИОННЫХ ФУНКЦИЙ

Коммутаторы, ассоциаторы и астраторы. Вычислим по формуле (19) работы [2] коммутаторы с участием гиперфункций $F = f(\tau, \mathbf{r}) + \gamma \mathbf{F}(\tau, \mathbf{r})$ и $G = g(\tau, \mathbf{r}) + \gamma \mathbf{G}(\tau, \mathbf{r})$, при условии, что их 4-градиенты отличны от нуля:

$$n_{1F} = [(\diamond F), G] = [G^*, (\diamond F)] = 2\gamma[\mathbf{G} \times \left(\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \tau} + \nabla f - \text{rot } \mathbf{F} \right)], \quad (32)$$

$$n_{2F} = [(\diamond F^*), G] = [G^*, (\diamond F^*)] = 2\gamma[\mathbf{G} \times \left(-\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \tau} + \nabla f + \text{rot } \mathbf{F} \right)], \quad (33)$$

$$n_{3F} = [(\diamond^* F), G] = [G^*, (\diamond^* F)] = 2\gamma[\mathbf{G} \times \left(\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \tau} - \nabla f + \text{rot } \mathbf{F} \right)], \quad (34)$$

$$n_{4F} = [(\diamond^* F^*), G] = [G^*, (\diamond^* F^*)] = 2\gamma[\mathbf{G} \times \left(-\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \tau} - \nabla f - \text{rot } \mathbf{F} \right)], \quad (35)$$

Аналогичные формулы описывают величины n_{iG} ($i = 1, 2, 3, 4$), если кватернионы F и G обменять местами. Суммируя формулы (32)–(35), получим

$$n_{1F} + n_{2F} + n_{3F} + n_{4F} = 0. \quad (36)$$

Кроме того, из формул (32)–(36) следует, что

$$N_{1F} = n_{1F} + n_{2F} = -(n_{3F} + n_{4F}) = 4\gamma[\mathbf{G} \times \nabla f], \quad (37)$$

$$N_{2F} = n_{1F} + n_{3F} = -(n_{2F} + n_{4F}) = 4\gamma[\mathbf{G} \times \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \tau}], \quad (38)$$

$$N_{3F} = n_{1F} + n_{4F} = -(n_{2F} + n_{3F}) = -4\gamma[\mathbf{G} \times \text{rot } \mathbf{F}]. \quad (39)$$

Согласно формуле (23) работы [2] вычислим ассоциаторы указанных гиперфункций:

$$\begin{aligned} m_F &= [(F, \diamond, G)] = -[(F, \diamond, G^*)] = -[(F^*, \diamond, G)] = -[(F, \diamond^*, G)] = \\ &= [(F^*, \diamond, G^*)] = [(F, \diamond^*, G^*)] = [(F^*, \diamond^*, G)] = -[(F^*, \diamond^*, G^*)] = \\ &= 2\gamma((\mathbf{F} \cdot \nabla) \mathbf{G} - \mathbf{F} \text{ div } \mathbf{G}). \end{aligned} \quad (40)$$

Из формулы (40) видно, что комплексное сопряжение функций или 4-градиента не меняет величину ассоциатора, но может изменить его знак, если число сопряжений нечетное. Если в фор-

мулах (40) обменять местами гиперфункции F и G , то ассоциатор

$$m_G = [(G, \diamond, F)] = 2\gamma((\mathbf{G} \cdot \nabla)\mathbf{F} - \mathbf{G} \operatorname{div} \mathbf{F}). \quad (41)$$

В соответствии с вышеприведенной *теоремой 5*, для подвижной целлы обращение в нуль ассоциатора вида (40) (или (41)) означает сохранение кватернионной функции F , если кватернионная функция G является скоростью перемещения центра масс локальной области. Следовательно, неассоциативности кватернионов отвечает разрушение закона сохранения той или иной гиперкомплексной функции в процессе перемещения целлы в гиперпространстве.

По формулам вида (24) работы [2] вычислим астраторы данных гиперфункций

$$h_{1F} = \langle (F, \diamond, G^*) \rangle = 2 \left\{ \mathbf{F} \cdot \operatorname{rot} \mathbf{G} + \gamma \left(f \operatorname{rot} \mathbf{G} + \left[\mathbf{F} \times \left(\frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \tau} - \nabla g \right) \right] \right) \right\}, \quad (42)$$

$$h_{2F} = \langle (F, \diamond^*, G) \rangle = 2 \left\{ \mathbf{F} \cdot \operatorname{rot} \mathbf{G} + \gamma \left(f \operatorname{rot} \mathbf{G} - \left[\mathbf{F} \times \left(\frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \tau} - \nabla g \right) \right] \right) \right\}, \quad (43)$$

$$h_{3F} = \langle (F^*, \diamond, G) \rangle = 2 \left\{ \mathbf{F} \cdot \operatorname{rot} \mathbf{G} + \gamma \left(-f \operatorname{rot} \mathbf{G} + \left[\mathbf{F} \times \left(\frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \tau} + \nabla g \right) \right] \right) \right\}, \quad (44)$$

$$h_{4F} = \langle (F^*, \diamond^*, G^*) \rangle = 2 \left\{ \mathbf{F} \cdot \operatorname{rot} \mathbf{G} + \gamma \left(-f \operatorname{rot} \mathbf{G} - \left[\mathbf{F} \times \left(\frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \tau} + \nabla g \right) \right] \right) \right\}. \quad (45)$$

Обмен местами гиперкомплексных функций F и G приводит к аналогичным формулам для величин h_{iG} ($i = 1, 2, 3, 4$). Из формул (42)–(45) находим, что

$$H_F = h_{1F} + h_{2F} + h_{3F} + h_{4F} = 8 \mathbf{F} \cdot \operatorname{rot} \mathbf{G}. \quad (46)$$

Сумма астраторов обращается в нуль при перпендикулярности вектора F к вихрю $\operatorname{rot} G$.

Правило дифференцирования произведения кватернионных функций. Установленные формулы позволяют получить правило дифференцирования произведения двух (и более) кватернионных функций. Например, целлярная производная от произведения двух гиперкомплексных функций F и G равна

$$\diamond(FG) = (\diamond F)G + F(\diamond G) + Q_{\Delta}, \quad (47)$$

где Q_{Δ} – дефект кватернионной производной, связанный с неассоциативностью, некоммутативностью и операцией взятия комплексного сопряжения от гиперфункций, равный

$$Q_{\Delta} = 0,25 H_F + \{m_G + 0,5(N_{1G} - N_{3F})\}, \quad (48)$$

здесь выражение, взятое в фигурные скобки, представляет собой векторную часть дефекта кватернионной производной.

Обращение дефекта кватернионной производной в нуль ($Q_{\Delta} = 0$) приводит к стандартному правилу дифференцирования произведения двух функций. Это происходит при выполнении условий:

$$\begin{cases} F \cdot \text{rot } G = 0 \\ [(-\nabla g + [G \times \nabla]) \times F] = 0 \end{cases} \quad (49)$$

Первое равенство описывает перпендикулярность вектора F к вихрю векторного поля G . Второе соотношение системы (49) с учетом формулы (2) преобразуется к виду

$$(G \cdot \nabla)F - G \text{ div } F + [G \times \text{rot } F] + [F \times \nabla g] = 0. \quad (50)$$

Рассмотрим два случая:

a) $(G \cdot \nabla)F - G \text{ div } F = 0$ (см. *теорему 5*); **б)** $(G \cdot \nabla)F - G \text{ div } F \neq 0$.

В первом случае ассоциатор (41) равен нулю, что указывает на индифферентность тройки кватернионов по отношению к способам их группировки. После скалярного умножения соотношения (50) на вектор G ($\text{rot } F$, F или ∇g) оно переходит в равенство

$$\begin{aligned} G \cdot [F \times \nabla g] &= 0 \quad (\text{rot } F \cdot [F \times \nabla g] = 0, \\ F \cdot [G \times \text{rot } F] &= 0, \quad \nabla g \cdot [G \times \text{rot } F] = 0), \end{aligned}$$

которое указывает на компланарность векторов G , F и ∇g ($\text{rot } F$, F и ∇g ; F , G и $\text{rot } F$ или ∇g , G и $\text{rot } F$). Во втором случае ассоциатор (41) отличен от нуля, поэтому с точностью до знака объем параллелепипеда, построенного, например, на G , F и ∇g должен быть равен

$$G \cdot [F \times \nabla g] = |G|^2 \text{ div } F - G \cdot (G \cdot \nabla)F. \quad (51)$$

Если объем параллелепипеда отличен от величины, стоящей в правой части равенства (51), то дефект кватернионной производной будет отличен от нуля.

Развитый математический формализм в последующих работах будет применен к решению различных физических задач, например, к выводу эволюционных уравнений неравновесной системы.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследование свойств покоящихся и подвижных локальных областей (целл) проводят с использованием целлярных и субстанциональных производных. Мобильность целлы учитывается в субстанциональном операторе конвективным слагаемым. Состояние локальной области, которое описывается гипераналитической функцией, при перемещении может сохраняться, если выполняются определенные условия. Скалярная и векторная составляющие гипераналитической функции удовлетворяют уравнениям, которые описывают продольные и поперечные волны, соответственно. Собственными состояниями целлярного оператора являются затухающие или нарастающие во времени продольные и поперечные волны. Его зеркальным состояниям отвечают области с противоположным временным поведением волн, в которых образуются «заряды» и наблюдаются «токи». Внешнее воздействие на неподвижную локальную область порождает бесконечную иерархию самозацепляющихся периодических процессов, распад которой происходит самопроизвольно в случае пропорциональности кватернионов внешних сил и их целлярных производных.

Предложенная кватернионная модель материи учитывает кинетико-динамический дуализм эволюционных процессов. Ее дальнейшее развитие требует создания гиперкомплексного анализа, в частности, вывода правил дифференцирования. Поэто-

му в данной работе было получено выражение для кватернионной целлярной производной от произведения двух гиперкомплексных функций. В силу особенностей физической алгебры ее вычисление сопровождается возникновением «дефекта» этой производной. При его обнулении правило дифференцирования произведения двух функций принимает классический вид.

1. *Дьярмати И.*, Неравновесная термодинамика, Мир, Москва (1974).
2. *Терехов С.В.*, ФТВД **25**, № 1-2, 5 (2015).
3. *Латшев Н.Н.*, Основы гидравлики и теплотехники, Академия, Москва (2012).
4. *Корн Г., Корн Т.*, Справочник по математике, Наука, Москва (1973).
5. *Кочин Н.Е.*, Векторное исчисление и начала тензорного анализа, Наука, Москва (1965).
6. *Морс Ф.М., Фешбах Г.*, Методы теоретической физики, Т.1, ИИЛ, Москва (1958).
7. *Борисенко А.И., Тарапов И.Е.*, Векторный анализ и начала тензорного исчисления, Вища школа, Харьков (1986).
8. *Терехов С.В.*, ФТВД **22**, №1, 33 (2012).
9. *Терехов С.В.*, Фракталы и физика подобия, Цифровая типография, Донецк (2011).

Terekhov S.V.

**PHYSICS-GEOMETRICAL DESCRIPTIONS OF HYPERSPACE.
III. CELLA AND SUBSTANCE OPERATORS.
DEFECT OF QUATERNION DERIVATIVE**

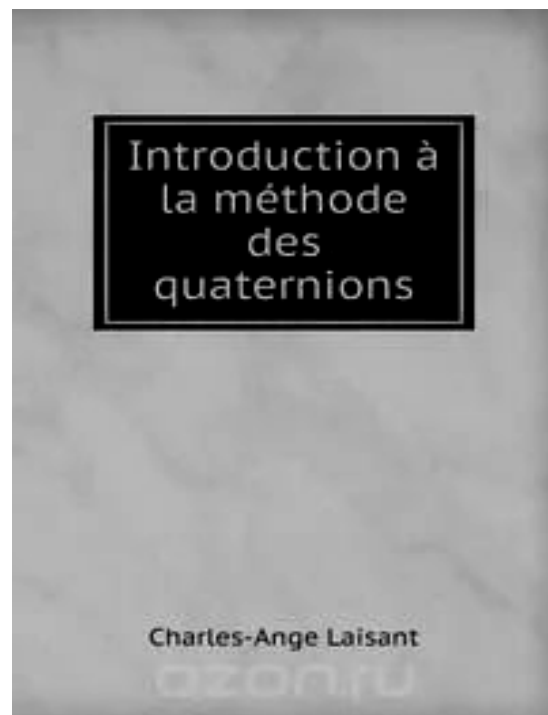
Description of local and transport a properties of substance implies application of differential calculation at research of local areas (cella). For description of processes in an immobile area cella apply derivatives, and in movable are matireal operators. Motion of cen-

tre-of-mass cella of causes appearance of convectional constituent of moving, and there is maintenance of quaternion function at implementation of certain terms.

In area of hyperanalyticity of quaternion function operating of cella operator on a function results in the local laws of maintenance of scalar constituents (material descriptions) and calibration of the field potentials, and also to determination of local rate-of-change of vectorial sizes. The eigenstates of cellar operator are quaternion functions, which are the decisions of equalizations, describing longitudinal and transversal waves. Besides wave motions at birth of the mirror states arises up "friction" (or "charge") and stream (or "current").

The reaction of immobile cella on external influence is accompanied by formation of endless hierarchy of self-hooking batch processes. Her disintegration carries spontaneous character under reaching the proportion of quaternions, related to external influence.

Further development of quaternion model of matter is unthinkable without development of hypercomplex differential calculation and, in particular, without the conclusion of rules of differentiation. Therefore the got expression for quaternion cellar of derivative from work of two hypercomplex functions presents scientific interest. The origin of "defect" this derivative is related to the features of physical algebra.



42. Физика и техника высоких давлений.

Донецк, 2016, т. 26, № 3-4, с. 129-140

PACS numbers: 02.10.De; 02.30.Tb; 45.20.-d; 45.50.-j

Терехов С.В.

**ФИЗИКО-ГЕОМЕТРИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ
ГИПЕРПРОСТРАНСТВА. IV. СОЛИТОН ХАСИМОТО.
МЕХАНИЧЕСКОЕ ДВИЖЕНИЕ ЦЕЛЛЫ**

Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина
ул. Р. Люксембург, 72, Донецк, 83114

Рукопись поступила в редакцию 11 января 2016 года

Рассмотрена изменчивость базиса сопутствующего трехгранника в обобщенной модели Серре-Френе, в которой учтен поворот локальной системы координат относительно вектора бинормали. Переменная траектория движения материальной частицы описана с учетом двухпараметрической зависимости базиса от времени и пройденного пути. Получены различные варианты нелинейного уравнения Шредингера, соответствующие областям скейлинга и трансформации солитона Хасимото. В рамках кватернионной модели установлены уравнения движения локальной области среды. Показано, что внутренняя энергия этой области расходуется на совершение работы и выделение тепла. Установлено, что в неподвижной области обратимые процессы формируют вихревые структуры.

Ключевые слова: солитон Хасимото, нелинейное уравнение Шредингера, локальная область, сила, движение

Розглянуто мінливість базису супутнього тригранника в узагальненій моделі Серрі-Френе, в якій врахований поворот локальної системи координат відносно вектора бінормалі. Мінлива траєкторія руху матеріальної частки описана з урахуванням двопараметричної залежності базису від часу і пройденого шляху. Отримано різні варіанти нелінійного рівняння Шредінгера, які відповідають областям скейлінга і трансформації солітону Хасімото. В рамках кватерніонів моделі вста-

новлені рівняння руху локальної області середовища. Показано, що внутрішня енергія цієї області витрачається на здійснення роботи і виділення тепла. Встановлено, що в нерухомій області оборотні процеси формують вихрові структури.

Ключові слова: солітон Хасимото, нелінійне рівняння Шредингера, локальна область, сила, рух

1. СОЛИТОН ХАСИМОТО

Движение физической частицы осуществляется вдоль экстремали, которая, согласно модели Эйлера-Лагранжа [1], отличается от других траекторий движения тем, что на ней действие достигает экстремального значения [2]. Кроме того, экстремаль расположена под определенным углом к силовым линиям поля (трансверсалям, см. рис. 1 из [3]), т.е. неизменность экстремали задается постоянством силовых полей. При изменении потенциальной поверхности будет меняться и геометрия экстремали, что может быть воспринято как изменение физических свойств движущейся частицы. В этой связи возникает проблема описания движения частицы в переменном потенциальном поле. С другой стороны, эту проблему можно свести к изучению влияния временной и естественной параметризации на поведение сопутствующего трехгранника (определение трехгранника см. в [4, с. 602-608]).

В этой связи следует указать на решение аналогичной задачи японским ученым Хасимото [5] в 1972 году. Он продемонстрировал связь системы уравнений Серре-Френе [6, с. 190-191; 7, с. 23-36] с нелинейным уравнением Шредингера (см., напр., [8, с. 574-578]). Тем самым было показано, как физико-геометрические характеристики пространства (кривизна и кручение) определяют волновую функцию уединенной волны (солитона) при временной и естественной параметризациях пространства.

В работе [3] исследована система уравнений типа Серре-

Френе с учетом поворота сопутствующего трехгранника относительно бинормали. Применим методику Хасимото к системе уравнений (1) из [3] для случая, когда тройка ортов A , B и C образуют декартов базис, т.е. взаимно перпендикулярны друг другу. Математически это означает выполнение равенств:

$$|A| = |B| = |C| = 1 \text{ и } A \cdot B = B \cdot C = C \cdot A = 0.$$

В данной постановке задачи орты A , B , C и характеристики пространства: кривизна K_1 , поворот вокруг бинормали K_2 (для системы Серре-Френе $K_2 = 0$) и кручения K_3 зависят от двух параметров: времени t и пройденного вдоль экстремали пути s . Домножим третье уравнение системы

$$\begin{cases} \frac{\partial A}{\partial s} = K_1 B - K_2 C \\ \frac{\partial B}{\partial s} = K_3 C - K_1 A \\ \frac{\partial C}{\partial s} = K_2 A - K_3 B \end{cases}, \quad (1)$$

на мнимую единицу Эйлера $i = \sqrt{-1}$ и прибавим результат ко второму уравнению системы (1), получим уравнение

$$\frac{\partial(B + iC)}{\partial s} = -iK_3(B + iC) - (K_1 - iK_2)A. \quad (2)$$

Вводя обозначения

$$B + iC = N \exp(-i\varphi), \quad \varphi = \int_0^s K_3(q, t) dq \text{ и } \psi = (K_1 - iK_2) \exp(i\varphi),$$

перепишем (2) в виде

$$\frac{\partial N}{\partial s} = -\psi A. \quad (3)$$

Орты B и C связаны с новыми комплексными векторами N и N^* соотношениями

$$B = \frac{1}{2}(N \exp(-i\varphi) + N^* \exp(i\varphi)), \quad (4)$$

$$C = -\frac{i}{2}(N \exp(-i\varphi) - N^* \exp(i\varphi)). \quad (5)$$

При этом векторы нового базиса A , N и N^* удовлетворяют соотношениям:

$$\begin{aligned} A \cdot A = |A|^2 = 1, \quad |N|^2 = |N^*|^2 = N \cdot N^* = 2, \\ A \cdot N = A \cdot N^* = N \cdot N = N^* \cdot N^* = 0. \end{aligned} \quad (6)$$

Подстановка (4) и (5) в первое уравнение (1) и учет (3) (и к нему комплексно-сопряженного равенства) приводит к системе уравнений для базиса векторов A , N и N^* :

$$\begin{cases} \frac{\partial A}{\partial s} = \frac{1}{2}(\psi^* N + \psi N^*) \\ \frac{\partial N}{\partial s} = -\psi A \\ \frac{\partial N^*}{\partial s} = -\psi^* A \end{cases} . \quad (7)$$

Вычислим вторую производную от векторной функции $A(s, t)$ по параметру s с учетом двух других уравнений системы (7), получим

$$\frac{\partial^2 A}{\partial s^2} = -|\psi|^2 A + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial s} N + \frac{\partial \psi}{\partial s} N^* \right). \quad (8)$$

Из уравнения (8) видно, что в случае независимости функции ψ от параметра s , оно принимает осцилляторный вид с частотой $\omega = |\psi| = \sqrt{K_1^2 + K_2^2}$.

Для исследования противоположного случая введем в рассмотрение вектор

$$Z = -\frac{i}{2}(\psi^* N - \psi N^*), \quad (9)$$

производная от которого по параметру s равна

$$\frac{\partial Z}{\partial s} = -\frac{i}{2} \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial s} N - \frac{\partial \psi}{\partial s} N^* \right). \quad (10)$$

Из определения вектора Z находим, что $Z^* = Z$, следовательно, Z является вещественным вектором. Из первого уравнения (7) и определения (9) находим, что

$$\begin{cases} \psi^* N = \frac{\partial A}{\partial s} + iZ \\ \psi N^* = \frac{\partial A}{\partial s} - iZ \end{cases} \quad (11)$$

Уравнение (11) показывает, что в качестве базиса можно выбрать векторы A , $\partial A/\partial s$ и Z . Аналогично, можно выбрать векторы A , $\partial A/\partial s$ и $\partial Z/\partial s$, тогда выполняются равенства

$$\begin{cases} \frac{1}{2} \frac{\partial |\psi|^2}{\partial s} N = \frac{\partial \psi}{\partial s} \frac{\partial A}{\partial s} + i\psi \frac{\partial Z}{\partial s} \\ \frac{1}{2} \frac{\partial |\psi|^2}{\partial s} N^* = \frac{\partial \psi^*}{\partial s} \frac{\partial A}{\partial s} - i\psi^* \frac{\partial Z}{\partial s} \end{cases} \quad (12)$$

С учетом (9) перепишем уравнение (8) в виде

$$\frac{\partial^2 A}{\partial s^2} - \kappa \frac{\partial A}{\partial s} + |\psi|^2 A = \lambda Z, \quad (13)$$

где вещественные параметры $\kappa = \frac{\partial \ln |\psi|}{\partial s}$, $\lambda = \frac{i}{2} \frac{\partial \ln(\psi^*/\psi)}{\partial s}$. Уравнение (13) описывает «осциллятор» с «затуханием» ($\kappa < 0$, или «раскачкой» при $\kappa > 0$) и «внешним возбуждением» (вектор Z определяется векторами N и N^* , т.е. векторами B и C), которое задается правой частью (13). Умножим первое уравнение (12) на функцию ψ , а второе – на ψ^* , вычтем из первого результата второй, после несложных преобразований получим соотношение:

$$\lambda \frac{\partial A}{\partial s} = \kappa Z - \frac{\partial Z}{\partial s}. \quad (14)$$

С учетом (14) уравнение (13) принимает вид

$$\frac{\partial^2 A}{\partial s^2} + |\psi|^2 A = \frac{\lambda^2 + \kappa^2}{\lambda} Z - \frac{\kappa}{\lambda} \frac{\partial Z}{\partial s} = \mathcal{Q}\left(Z, \frac{\partial Z}{\partial s}, \kappa, \lambda\right). \quad (15)$$

Из (15) вытекает, что «свободные колебания» орта A на экстремале будут наблюдаться при выполнении равенства

$$\mathcal{Q}\left(Z, \frac{\partial Z}{\partial s}, \kappa, \lambda\right) = 0,$$

т.е.

$$\kappa \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial s} = (\lambda^2 + \kappa^2) \mathbf{Z}. \quad (16)$$

Так как параметры уравнения (13) (а также (15)) κ и λ зависят от естественного параметра s , то вид правой части будет меняться в зависимости от их значений. Например,

$$\mathcal{Q}\left(\mathbf{Z}, \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial s}, \kappa, \lambda\right) = \begin{cases} \lambda \mathbf{Z}, & \kappa = 0 \\ 0, \text{ формула(16)}, & \\ \mp i \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial s}, & \kappa = \pm i \lambda \end{cases},$$

что можно интерпретировать как воздействие переменного потенциала на сопутствующий трехгранник.

Изменения нового базиса векторов A , N и N^* с течением времени описывают локальные производные от этих векторов по времени. Выполним разложение этих производных по базису векторов A , N и N^* :

$$\begin{cases} \frac{\partial A}{\partial t} = aA + bN + cN^* \\ \frac{\partial N}{\partial t} = \alpha A + \beta N + \chi N^* \end{cases}, \quad (17)$$

где коэффициенты a , b , c , α , β и χ являются комплексными величинами. В силу вещественности вектора A выполняются равенства: $a^* = a$, $b^* = c$, $c^* = b$. Используя соотношения (6), продифференцированные по времени, можно показать, что $a=0$, $\chi=0$, $\beta^* = -\beta$ (следовательно, $\beta = iF$, где F – вещественная функция), $b = -\alpha^* / 2$. Следовательно, система уравнений (17) принимает вид

$$\begin{cases} \frac{\partial A}{\partial t} = -\frac{1}{2}(\alpha^* N + \alpha N^*) \\ \frac{\partial N}{\partial t} = \alpha A + iFN \end{cases}, \quad (18)$$

причем скорости изменения базисных векторов A , N и N^* связаны между собой равенством

$$F \frac{\partial A}{\partial t} = \frac{i}{2} \left(\alpha^* \frac{\partial N}{\partial t} - \alpha \frac{\partial N^*}{\partial t} \right).$$

Так как векторы $\partial A / \partial s$, \mathbf{Z} , $\partial \mathbf{Z} / \partial s$ и $\partial A / \partial t$ определяются только базисными векторами N и N^* , то можно предположить, что между ними существует линейная зависимость вида

$$\frac{\partial A}{\partial t} = B_1 \frac{\partial A}{\partial s} + B_2 \mathbf{Z} + B_3 \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial s}, \quad (19)$$

где коэффициенты B_i ($i = 1, 2, 3$) являются вещественными и независимыми от параметризации пространственно-временного континуума. Из равенства (19) находим, что проективный коэффициент

$$\alpha = - \left[(B_1 + iB_2) \psi + iB_3 \frac{\partial \psi}{\partial s} \right], \quad (20)$$

Дифференцируя уравнения системы (18) по естественному параметру s , а первые два уравнения системы (7) по времени t , приравнявая соответствующие смешанные производные и коэффициенты при одинаковых базисных векторах, получим после несложных преобразований следующие уравнения

$$\begin{cases} -i \frac{\partial \psi}{\partial t} = i \frac{\partial \alpha}{\partial s} + F \psi \\ i \frac{\partial F}{\partial s} = \frac{1}{2} (\alpha^* \psi - \alpha \psi^*) \end{cases}. \quad (21)$$

Рассмотрим частные случаи полученных соотношений:

а) Солитон Хасимото ($B_1 = B_2 = 0, B_3 = 1$). Решение Хасимото имеет место в том случае, когда $\alpha = -i \partial \psi / \partial s$, что соответствует реализации равенства $\partial A / \partial t = \partial \mathbf{Z} / \partial s$, которое отображает *локальное индукционное приближение* (см., напр., [9, с. 101]) в модели Хасимото ([9, с. 268-270]), при этом величина

$$2 \partial F / \partial s = \partial |\psi|^2 / \partial s$$

($F = \frac{1}{2} |\psi|^2 + C(t)$), а функция ψ удовлетворяет нелинейному уравнению Шредингера (см. первое уравнение из системы (21))

$$-i \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial s^2} + \left(\frac{1}{2} |\psi|^2 + C(t) \right) \psi. \quad (22)$$

Отметим, что систему (21) можно записать в виде

$$\begin{cases} \frac{\partial \alpha}{\partial s} = i \mathbf{N} \cdot \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial t} \\ \frac{\partial F}{\partial s} = \mathbf{Z} \cdot \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \end{cases}.$$

б) Солитон подобный солитону Хасимото ($B_2 = 0$). Иное решение системы (21) получим, если положить

$$\alpha = -B_1 \psi - i B_3 \partial \psi / \partial s.$$

Такой выбор проективных коэффициентов отвечает выполнению равенств

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = B_1 \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial s} + B_3 \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial s}, \\ \left\{ \begin{aligned} -i \frac{\partial \psi}{\partial t} &= -i B_1 \frac{\partial \psi}{\partial s} + B_3 \frac{\partial^2 \psi}{\partial s^2} + F \psi \\ F &= \frac{B_3}{2} |\psi|^2 + C(t) \end{aligned} \right. \end{cases}. \quad (23)$$

в) Солитон неподобный солитону Хасимото ($B_1 = 0$). В этом случае проективный параметр равен $\alpha = -i(B_2 \psi + B_3 \partial \psi / \partial s)$, следовательно, получим

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = B_2 \mathbf{Z} + B_3 \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial s}, \\ \left\{ \begin{aligned} -i \frac{\partial \psi}{\partial t} &= B_2 \frac{\partial \psi}{\partial s} + B_3 \frac{\partial^2 \psi}{\partial s^2} + F \psi \\ F &= B_2 \int_0^s |\psi(q)|^2 dq + \frac{B_3}{2} |\psi|^2 + C(t) \end{aligned} \right. \end{cases}. \quad (24)$$

Отметим, что решение Хасимото вытекает из решения системы (23) (или (24)) при $B_1 = 0$ (или $B_2 = 0$) и $B_3 = 1$. Из приведенных решений видно, что вид солитона и нелинейного уравнения Шредингера существенно зависит от параметра-функции α , определяющего разложения локальных скоростей изменения базисных векторов по этим векторам (система (18)).

Таким образом, возникновение квантового объекта связано с изменчивостью траектории движения (кривизна, кручение и поворот пространственной кривой), что можно описать с помощью зависимости базисных векторов сопутствующего трехгранника от двух параметров – времени t и пройденного трехгранником пути s . Другими словами, квантовый объект – это материальная частица, которая движется вдоль изменяющейся траектории. $CL(change\ line)$ -движение описывается нелинейным уравнением Шредингера, вид которого определяется связью между проективным коэффициентом α и волновой функцией ψ . При определенных значениях коэффициентов B_i ($i = 1, 2, 3$) (формула (19)) солитон попадает в область фрактальности (сохраняется подобие солитону Хасимото) или трансформации (нарушение подобия). Следовательно, перемещение материальной частицы по CL приводит к замене классических законов модели Эйлера-Лагранжа на законы модели Серра-Френе-Шредингера-Хасимото.

Переход с уровня квантовых объектов на уровень движения материальных сред приводит к качественному и количественному изменению параметров движения, основными из которых являются энерго-импульсные закономерности и уравнение для сил, действующих на выделенную локальную область (*целлу*) материала. В этой связи рассмотрим закономерности изменения состояния неподвижной и подвижной *целл*.

2. МЕХАНИЧЕСКОЕ ДВИЖЕНИЕ ЦЕЛЛЫ

а) *Механика целлы при отсутствии внешних сил.* При исследовании сплошных сред материальной точкой считают математическую точку, положение которой в выбранной системе координат задается радиус-вектором r в момент времени t (или $\tau = ct$, где c – характерная скорость движения в данной среде), и ее малую окрестность. Совокупность материальных точек выделенной из среды области, размеры которой значи-

тельно меньше размеров исследуемой системы, принято называть *локальной областью (целлой)*.

Неподвижность локальной области (целлы) внутри той или иной субстанции обеспечивается протеканием внутренних процессов, которые не вызывают смещения центра масс целлы (скорость центра масс выделенной области $u = 0$). Взаимодействие области с внешним окружением компенсируется появлением локальных сил. Их равнодействующая сила X задается частной производной по времени от импульса целлы p , градиентом энергии ε ($\text{grad}\varepsilon$) и вихрем импульсного поля ($\text{rot } p$). Если сила X и скорость движения центра масс целлы u отличны от нуля, то целла будет терять энергию за счет производства работы и реализации необратимых процессов, например, рассеивания тепла.

Изменение физических величин внутри локальной области с неподвижным центром масс при отсутствии внешних сил описывается формулами гипераналитичности (10) из [10]. В случае движения центра масс целлы со скоростью u надо рассматривать действие субстанциального оператора D (см. формулу (6) из [10]) на кватернион энергии ε – импульса p , который задается формулой (18) $P = E / E_0 + \gamma P / (m_0 c) = \varepsilon + \gamma p$ из [11]. Тогда условия отсутствия субстанционального градиента движения локальной области (сохранение кватерниона энергии-импульса) сводятся к уравнениям

$$DP=0: \begin{cases} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \tau} + \text{div } p = X \cdot u \\ -\text{grad}\varepsilon + \text{rot } p - u \frac{\partial \varepsilon}{\partial \tau} - [u \times X] - \{(u \cdot \nabla)p - u \text{div } p\} = F \end{cases}, \quad (25)$$

где $f + \text{grad}\varepsilon - \text{rot } p = -X$ – равнодействующая всех локальных сил, действующих на выделенную область, $\partial p / \partial \tau = f$ – локальная, а $dp / d\tau = F$ – глобальная реакции материальной точки на изменение ее импульса. Отметим, что при компенсации градиента энергии вихрем импульсного поля ($\text{grad}\varepsilon = \text{rot } p$) соблю-

дается третий закон Ньютона для локальной реакции: $f = -X$. Кроме того, по теореме 5 из [10] выражение, стоящее в фигурных скобках во втором уравнении системы (25), равно нулю ($(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{p} - \mathbf{u} \operatorname{div} \mathbf{p} = 0$) в силу сохранения кватерниона энергии-импульса.

Закон локального сохранения энергии целлы (первое уравнение системы (25) с нулевой правой частью) наблюдается при: а) *отсутствии локальной равнодействующей реакции* ($X = 0$). Отсутствие локальной ($X = 0$) и глобальной ($F = 0$) реакций для подвижной целлы приводит к выполнению равенства (с учетом первого уравнения системы (25))

$$\operatorname{grad} \varepsilon = \operatorname{rot} \mathbf{p} + \mathbf{u} \operatorname{div} \mathbf{p}, \quad (26)$$

которое вытекает из второго уравнения системы (25). Уравнение (26) является аналогом теоремы Гельмгольца (см., напр., [12, с. 209-220; 13, с. 177-178]), которая на физическом языке означает разложение любого механического движения на прямолинейное (слагаемое $\mathbf{u} \operatorname{div} \mathbf{p}$) и вращательное ($\operatorname{rot} \mathbf{p}$). При нулевой расходимости импульсного поля целлы ($\operatorname{div} \mathbf{p} = 0$ – соленоидальное поле или несжимаемая субстанция при постоянном значении массы целлы) выполняется локальный закон противодействия ($f = -X$), а покой и движение локальной области становятся неразличимыми. Таким образом, инерциальные системы отсчета являются следствием отсутствия локальной и глобальной реакций тел отсчета на состояния покоя или равномерного прямолинейного движения, а также нулевой расходимости импульсного поля.

Аналогичное поведение локальной области при наличии локальной ($X \neq 0$) и глобальной ($F \neq 0$) реакций целлы, а также при условии $\operatorname{div} \mathbf{p} \neq 0$, согласно системе (25), наблюдается при выполнении соотношений:

$$X \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (X \perp \mathbf{u}), \quad \mathbf{u} \operatorname{div} \mathbf{p} - [\mathbf{u} \times X] = F.$$

Если отсутствует локальная реакция целлы ($X = 0$), а импульсное поле задается равенством $\mathbf{p} = -K \operatorname{grad} \varepsilon$, то при постоянном

кинетическом коэффициенте K между глобальной F и локальной реакцией f материальной точки устанавливается соотношение $F = f - uK\Delta\varepsilon$, а энергия ε подчиняется уравнению параболического типа (см. первое уравнение системы (25)). Из полученного равенства следует совпадение локальной и глобальной реакций материальной точки для неподвижной целлы; б) *неподвижности целлы* ($u=0$), когда энергия целлы сохраняется во времени ($\partial\varepsilon/\partial\tau=0$ по первому уравнению системы (25)), а в пространстве (по второму уравнению системы (25)) выполняется равенство $-\text{grad}\varepsilon + \text{rot } p = F$, т.е. в материальной среде возникает градиент энергии и вихрь импульсного поля, компенсирующие действие глобальной реакции; в) *перпендикулярности локальной силы к скорости движения центра масс локальной области* ($X \cdot u = 0$ или $X \perp u$), что соответствует, например, движению материальных точек по окружности (эллипсу) вокруг притягивающего центра. В перечисленных случаях локальная область является консервативной системой с неизменной энергией.

Учитывая определение локальной силы X , перепишем первое уравнение системы (25) в виде

$$d\varepsilon + \delta A = [u \cdot \text{rot } p - \text{div } p] d\tau, \quad (27)$$

где введено обозначение $\delta A = f \cdot u d\tau$ для изменения работы силы f . Так как сила f задается локальной производной по времени от импульса p , то изменение работы не является полным дифференциалом ($f \cdot u \neq dA/d\tau$), поэтому обозначение изменения работы δA указывает на этот факт. Сравнивая (27) с первым законом термодинамики [14, с. 41] (количество «частиц» в целле будем считать неизменным), можно записать, что изменение тепла в локальной области, вызванное ее механическим движением, равно

$$\delta Q = [u \cdot \text{rot } p - \text{div } p] d\tau. \quad (28)$$

Теорема 6. Для неподвижной целлы расходимость импульсного поля не возрастает.

Доказательство: Так как выделяемое тепло (28) связано с хаотизацией движения частиц, т.е. с изменением энтропии (изменение энтропии dS ($\delta Q = TdS$, где T – температура целлы) равно нулю для обратимого процесса и положительно для необратимого процесса), то с ростом времени величина

$$\mathbf{u} \cdot \text{rot } \mathbf{p} - \text{div } \mathbf{p}$$

не убывает. Следовательно, для неподвижной целлы ($\mathbf{u} = 0$) расходимость импульсного поля не возрастает ($\text{div } \mathbf{p} \leq 0$).

Следствие из Теоремы 6: обратимый термодинамический процесс в неподвижной целле сопровождается возникновением вихревого поля. Так как в этом случае расходимость импульсного поля равна нулю, то импульс представим в виде

$$\mathbf{p} = \text{rot } \mathbf{A} \quad (\text{div}(\text{rot } \mathbf{A}) \equiv 0),$$

где \mathbf{A} – векторный потенциал, порождающий локальный вихрь. Возникающие в целлах локальные вихри формируют вихревые структуры в термодинамической системе в целом.

б) *Влияние внешних сил на механическое движение целлы.* Действие окружающей среды на выделенную локальную область может приводить к нарушению закона сохранения квантиона энергии-импульса ($DP \neq 0$), что приводит к замене системы (25) на систему уравнений

$$DP = \Phi = \varphi - \gamma \Phi: \begin{cases} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \tau} + \text{div } \mathbf{p} - \mathbf{X} \cdot \mathbf{u} = \varphi \\ \mathbf{F} + \text{grad } \varepsilon - \text{rot } \mathbf{p} + \mathbf{u} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \tau} + [\mathbf{u} \times \mathbf{X}] + \{(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{p} - \mathbf{u} \text{div } \mathbf{p}\} = -\Phi \end{cases}, (29)$$

причем величина $(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{p} - \mathbf{u} \text{div } \mathbf{p} \neq 0$ из-за невыполнения условий теоремы 5 из [10]. Из приведенных формул видно, что при действии внешней силы, компоненты которой удовлетворяют системе уравнений

$$\begin{cases} 0 = \varphi \\ (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{p} - \mathbf{u} \text{div } \mathbf{p} = -\Phi \end{cases}, (30)$$

нарушаются условия Теоремы 5 из [10], но тем не менее выполняются уравнения (25). Система уравнений (30) указывает

на то, что в глобальном масштабе кватернион энергии-импульса не сохраняется, но может оставаться неизменным на локальном уровне ($DP \neq 0$, но $\diamond P = 0$) при специфическом виде внешней кватернионной силы $\Phi = 0 - \gamma \Phi$, где векторная часть определяется вторым уравнением системы (30).

Взаимодействие подвижных локальных областей между собой изменяет как локальные силы, так и импульсы частиц в каждой из целл. В этой связи для получения закона изменения энергии для всей термодинамической системы надо проводить осреднение выражения (27) с учетом (28) по ансамблю целл или по времени. В результате получим эмпирически установленный первый закон термодинамики, для средних величин. Следовательно, представленный подход не только демонстрирует скейлинговое подобие при переходе от уровня целл к уровню термодинамических систем, но и указывает на выполнение первого закона термодинамики для уровня локальных областей. Кроме того, в рамках данной модели выполнение первого закона термодинамики не определяет статус целлы, т.е. он не связан с термодинамической равновесностью или неравновесностью локальной области, а также с протеканием в целле обратимых и необратимых процессов. В этой связи возникает необходимость разработки термодинамической концепции неравновесности и выявления связи состояния термодинамической системы с протекающими в ней процессами.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Движение материальных частиц и интерпретация их физических свойств существенно зависит от поведения полей, в которых они перемещаются. Если поля формируют неизменный потенциальный «ландшафт», то при отсутствии инерциальных и диссипативных сил частица движется вдоль экстремали Эйлера-Лагранжа. Изменяющийся «ландшафт» формирует переменную траекторию, которая приобретает новый вид в каждой

точке пространственно-временного континуума. Это непостоянство траектории движения можно охарактеризовать параметрами самого пространства-времени (кривизна, кручение и поворот), влияющих на базисные векторы сопутствующего трехгранника (уравнения Серра-Френе). Уравнения эволюции базисных векторов в качестве коэффициентов содержат проективные величины, связанные с волновой функцией, описывающей поведение квантового объекта, называемого солитоном Хасимото (нелинейное уравнение Шредингера).

В работе данная проблема рассмотрена на основе ранее предложенной автором обобщенной модели Серра-Френе, которая учитывает дополнительно поворот сопутствующего трехгранника вокруг вектора бинормали. Получены эволюционные соотношения, зависящие от проективных коэффициентов и указано на существование солитонов иного вида, чем уединенная волна Хасимото. Кроме того, продемонстрировано наличие областей фрактальности и трансформации этого солитона в зависимости от связи скорости изменения одного из базисных векторов с двумя другими векторами и естественными скоростями изменения указанных в работе векторных функций.

Переход с уровня движения индивидуальных частиц вдоль изменяющейся траектории движения на уровень локальных областей термодинамической системы сопровождается изменением приоритетных величин (осуществляется путем перехода от векторов сопутствующего трехгранника к кватерниону энергии-импульса). Перемещение материальной частицы может происходить в покоящейся или движущейся локальной области под воздействием внутренних и внешних сил. В случае протекания обратимых термодинамических процессов в неподвижной целле возможно формирование вихревых структур. Действие специфических внешних сил может приводить к сохранению кватерниона энергии-импульса на локальном масштабном уровне.

1. В.Ф. Гантмахер, Лекции по аналитической механике, Физматлит, Москва (2001).
2. К. Ланцош, Вариационные принципы механики, Мир, Москва (1965).
3. С.В. Терехов, ФТВД **25**, № 1-2, 5 (2015).
4. М.Я. Выгодский, Справочник по высшей математике, Наука, Москва (1977).
5. Н. Hasimoto, Journal of Fluid Mechanics **51**, № 3, 477 (1972).
6. А.И. Борисенко, И.Е. Тарапов, Векторный анализ и начала тензорного исчисления, Вища школа, Харьков (1986).
7. В. Блашке, Введение в дифференциальную геометрию, Удмуртский университет, Ижевск (2000).
8. Дж. Уизем, Линейные и нелинейные волны, Мир, Москва (1977).
9. С.В. Алексеенко, П.А. Куйбин, В.Л. Окулов, Введение в теорию концентрированных вихрей, Институт теплофизики СО РАН, Новосибирск (2003).
10. С.В. Терехов, ФТВД **26**, № 1-2, 106 (2016).
11. С.В. Терехов, ФТВД **25**, № 3-4, 112 (2015).
12. Н.Е. Кочин, Векторное исчисление и начала тензорного анализа, Наука, Москва (1965).
13. Г. Корн, Т. Корн, Справочник по математике, Наука, Москва (1973).
14. И.С. Квасников, Термодинамика и статистическая физика, Т.1. Теория равновесных систем: Термодинамика, Едиториал УРСС, Москва (2002).

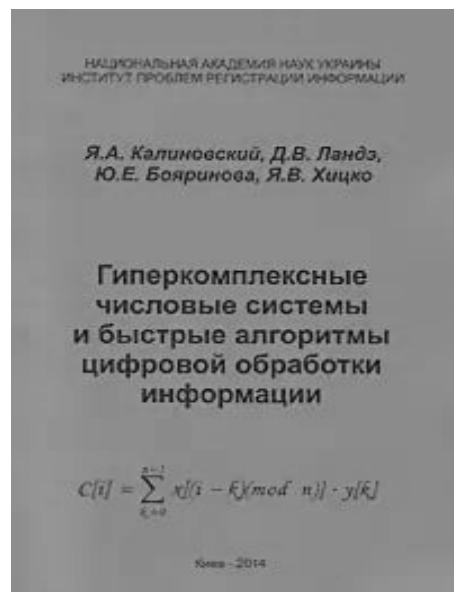
Terekhov S.V.

**PHYSICS-GEOMETRICAL DESCRIPTIONS OF HYPERSPACE.
IV. SOLITON HASHIMOTO. MECHANICAL MOVEMENT CELLA.**

We consider the variability basis accompanying trihedron in a generalized model of Serre-Frene, which takes into account the

rotation of the local coordinate system relative to the binormal vector. Partly trajectory of motion of a particle is described taking into account the two-parametric basis depending on the time and distance traveled. We get different versions of a nonlinear Schrödinger equation corresponding to the areas of scaling and transformation of the soliton Hashimoto. As part of the quaternion equations of motion of the model installed local area environment. It is shown that the internal energy of the field is consumed to perform the work and heat. It was found that in the area of fixed reversible processes formed vortex structures.

Keywords: soliton Hashimoto, nonlinear Schrödinger equation, the local area, the strength, the movement.



43. Физика и техника высоких давлений.

Донецк, 2017, т. 27, № 3, с. 69-79

PACS numbers: 02.10.De; 02.30.Tb; 45.20.-d; 45.50.-j

Терехов С.В.

**ФИЗИКО-ГЕОМЕТРИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ
ГИПЕРПРОСТРАНСТВА. V. ПОЛЕ ГИПЕРДВОЙНЫХ
КВАТЕРНИОНОВ**

Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина
ул. Р. Люксембург, 72, Донецк, 83114

Рукопись поступила в редакцию 20 июня 2017 года

Исследовано кватернионное поле гиперкомплексных структур Гамильтона-Гиббса с различными калибровками, накладываемыми на скалярную и векторную части потенциала. Показано, что при воздействии на неподвижную локальную область внешнего поля с нулевой скалярной частью, могут наблюдаться те или иные поля, связанные с различным поведением векторного потенциала. Например, отсутствие субстанционального градиента кватернионного поля приводит к наложению на потенциалы калибровки Лоренца и появлению электромагнитного поля Максвелла. Найдена связь особенностей кватернионного дифференциального исчисления с физическими характеристиками для гипераналитической плотности энергии кватернионного поля. Установлено, что произведение двух гипераналитических кватернионов не описывается гипераналитической функцией, если дефект кватернионной производной отличен от нуля. Показано, что помимо стандартных сил (напр., силы Лоренца) на «заряд» в кватернионном поле действуют дополнительные силы.

Ключевые слова: локальная область, кватернион, гипераналитичность, плотность распределения «зарядов», плотность «тока», скалярный и векторный потенциалы

1. ВВЕДЕНИЕ: ВИДЫ КВАТЕРНИОНОВ

В течение последних пятидесяти лет наблюдается устойчивая тенденция к возрождению применения в геометрии и физике функций вида $\Phi = \varphi + \gamma \frac{\mathbf{A}}{c}$ [1-12] (скалярная $Sc(\Phi) = \varphi$ и векторная $Ve(\Phi) = \mathbf{A}$ части могут зависеть, например, от пространственно-временных аргументов \mathbf{r} и t , c – характерная скорость, а квадрат «цвета» кватерниона равен

$$\gamma^2 = \begin{cases} -1 - \text{гиперкомплексные} \\ 0 - \text{гипердуальные} \\ +1 - \text{гипердвойные} \end{cases} . \quad (1)$$

«Цветность» (1) однотипных кватернионов проявляется при их перемножении, т.к. произведение векторных составляющих определяется формулой

$$\gamma \mathbf{A} \gamma \mathbf{B} = \gamma^2 (\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} - \gamma [\mathbf{A} \times \mathbf{B}]) . \quad (2)$$

Кватернионные теории позволяют записать известные физические и математические соотношения в простой и наглядной форме [1, 2, 5-12]. Например, гипердуальные кватернионы используют для описания винтовых движений [1]; условия сопряженной гипераналитичности градиента псевдокватернионов [6] полностью соответствуют уравнениям Максвелла для электромагнитного поля в вакууме и т.д. Это указывает на возможность решения других проблем и задач с помощью гиперкомплексного исчисления.

Одной из таких задач является отыскание и исследование уравнений тех полей [9], которые описываются кватернионами другой «цветности». Математическая сторона проблемы связана с давними попытками аксиоматизации теоретической физики и внедрением в ее основы геометрико-алгебраических идей. С физической стороны, признание корпускулярно-волнового дуализма де Бройля [13] и попытка Максвелла записать уравнения электромагнитного поля в виде гипераналитичности ква-

тернионной функции [14, с.489] (см. также работы автора [6, 8, 9]) указывают на то, что такие попытки небезосновательны. Для описания состояний вещества и поля необходимо исследовать кватернионные функции разной «цветности»; сравнить уравнения гипераналитичности и гипергармоничности с уравнениями феноменологических моделей по материальным полям; выяснить соответствие между особенностями кватернионного исчисления и их физическим содержанием.

Вначале исследуем условия гипераналитичности и гипергармоничности кватернионов Гамильтона-Гиббса, введенных в работе [15].

2. УСЛОВИЯ ГИПЕРАНАЛИТИЧНОСТИ И ГИПЕРГАРМОНИЧНОСТИ ПОЛЕВЫХ КВАТЕРНИОНОВ ГАМИЛЬТОНА-ГИББСА

Согласно формуле (10) из [16], гипердвойные кватернионные функции (кватернионы Гамильтона-Гиббса) удовлетворяют системе безразмерных уравнений гипераналитичности (далее по тексту положим скорость $c=1$)

$$\diamond\Phi = 0 : \begin{cases} \frac{\partial \varphi}{\partial \tau} + \operatorname{div} \mathbf{A} = 0 \\ \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial \tau} + \operatorname{grad} \varphi - \operatorname{rot} \mathbf{A} = 0 \end{cases}, \quad (3)$$

где $\diamond = \frac{\partial}{\partial \tau} + \gamma \nabla$ – оператор «тетра», $\nabla = \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}$ – оператор «набла», $\tau = t/l$, t – время в пространственных единицах измерения, l – характерная длина, $\mathbf{r} = \mathbf{r}(x, y, z)/l$ – радиус-вектор, определяющий положение точки с координатами x , y и z ,

$$\operatorname{div} \mathbf{A} = \nabla \cdot \mathbf{A}; \operatorname{grad} \varphi = \nabla \varphi; \operatorname{rot} \mathbf{A} = [\nabla \times \mathbf{A}].$$

Так как кватернион $\Phi(\tau, \mathbf{r})$ зависит от действительных переменных τ и \mathbf{r} , то его аргументами являются гиперкомплексные структуры $R = \tau + \gamma \mathbf{r}$ и $R^* = \tau - \gamma \mathbf{r}$, т.е. $\Phi = \Phi(R, R^*)$. Отметим тот факт, что при выполнении условий (3) выполняется также равенство $\diamond^* \Phi^* = 0$ и не обращаются в нуль локальные кватер-

нионные производные $\diamond^* \Phi \neq 0$, $\diamond \Phi^* \neq 0$.

Для *неподвижной* локальной области (скорость перемещения ее центра масс $u=0$, см. формулу (9) из [16]) условия (3) определяют независимость кватерниона $\Phi(R, R^*)$ от комплексно-сопряженной структуры R^* . Кроме того, неоднозначность физического определения скалярного $\varphi(R, R^*)$ и векторного потенциалов $\mathbf{A}(R, R^*)$ гиперкомплексной функции $\Phi(R, R^*)$ связана с тем, что физически измеримые функции (например, напряженности материальных полей) определяются частными производными от потенциалов. Поэтому при решении физических задач на потенциалы полей накладывают дополнительные ограничения, которые определяют их *калибровку*. Если на *неподвижную* локальную область оказывает воздействие внешнее поле с напряженностью $\mathbf{E}^* = 0 - \gamma \mathbf{E}$, то во всей системе, состоящей из таких целл, будет отсутствовать субстанциональный градиент кватернионного поля при выполнении условий (формула вида (25) из [16])

$$D\Phi = 0 \Leftrightarrow \diamond \Phi = \mathbf{E}^* : \begin{cases} \frac{\partial \varphi}{\partial \tau} + \operatorname{div} \mathbf{A} = 0 \\ \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial \tau} + \operatorname{grad} \varphi - \operatorname{rot} \mathbf{A} = -\mathbf{E} \end{cases} . \quad (4)$$

а) *калибровка Лоренца* [17, с.228] соответствует первому уравнению (4). Введем в рассмотрение два типа поля $\mathbf{E} = \mathbf{E}_1 + \mathbf{E}_2$:

$$\mathbf{E}_1 = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial \tau} - \operatorname{grad} \varphi, \quad (5)$$

$$\mathbf{E}_2 = \operatorname{rot} \mathbf{A}. \quad (6)$$

Применение операции дивергенции к уравнениям (5) и (6) с учетом первого уравнения (4) приводит к уравнениям

$$\operatorname{div} \mathbf{E}_1 = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \tau^2} - \Delta \varphi = -\square \varphi, \quad (7)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{E}_2 = 0 \quad (8)$$

($\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ – оператор Лапласа, $\square = \Delta - \frac{\partial^2}{\partial \tau^2}$ – оператор

Даламбера). Действуя оператором ротора на (5), получим

$$\operatorname{rot} \mathbf{E}_1 = -\frac{\partial \mathbf{E}_2}{\partial \tau}. \quad (9)$$

Вычислив частную производную по времени от (5) и применив к первому уравнению системы (4) оператор «набла», найдем уравнение

$$\operatorname{rot} \mathbf{E}_2 = \frac{\partial \mathbf{E}_1}{\partial \tau} + \square \mathbf{A}. \quad (10)$$

Сравнение уравнений (5)-(10) с теорией электромагнитного поля Максвелла (см., напр., [17, п.4.12]) показывает, что векторная функция \mathbf{E}_1 описывает «электрическое» поле, а \mathbf{E}_2 – «магнитное». При этом выполняются равенства

$$\square \varphi = -4\pi \rho, \quad (11)$$

$$\square \mathbf{A} = -4\pi \mathbf{j}, \quad (12)$$

здесь ρ – скалярная функция плотности распределения «заряда», а \mathbf{j} – векторная функция плотности «тока». После введения гиперкомплексной плотности распределения «заряда»

$$Q = \rho + \gamma \mathbf{j} \quad (13)$$

соотношения (11) и (12) можно записать в кватернионном виде

$$\square \Phi = -4\pi Q. \quad (14)$$

В области гипераналитичности (см. условия (3)) кватерниона (13) наблюдается локальный закон сохранения плотности распределения «заряда» ρ , а плотность «тока» удовлетворяет уравнению, которое имеет вид второго уравнения системы (3).

Отметим, что уравнения (11) и (12) являются волновыми уравнениями для потенциалов кватернионного поля [17, с.228]. Таким образом, *уравнения Максвелла* являются следствием отсутствия субстанционального градиента [16] кватернионного поля $\Phi(\mathbf{R}, \mathbf{R}^*)$ при действии на локальную область внешнего поля специфического вида (формула вида (25) из [16]), наложения на потенциалы калибровки Лоренца и ее естественном возникновении в условиях (3) и (4);

б) калибровка Кулона описывает соленоидальное векторное поле \mathbf{A} ($\mathbf{A} = \text{rot} \mathbf{W}$, [17, п.4.10]), для которого выполняется равенство

$$\text{div} \mathbf{A} = 0. \quad (15)$$

Из первого уравнения (4) следует, что поле Кулона характеризуется стационарным скалярным потенциалом φ , для которого (11) принимает вид уравнения Пуассона [18, с.56] (в единицах системы СГС)

$$\Delta \varphi = -4\pi \rho. \quad (16)$$

Отметим, что при выполнении условий (3) взятие операции дивергенции (div) от второго уравнения системы переводит его в уравнение Лапласа;

в) калибровка Лапласа ([17, п. 4.11]) задается соотношениями

$$\text{div} \mathbf{A} = 0, \text{rot} \mathbf{A} = 0, \quad (17)$$

а уравнение Лапласа

$$\Delta \varphi = 0 \quad (18)$$

описывает локальную область, в которой отсутствуют «заряды», «магнитное» поле и наблюдается стационарное скалярное поле φ , порождающее «электрическое» поле. Поле не достигает экстремального значения в областях, где выполняется уравнение Лапласа (18) и концентрируется в тех точках, где $\Delta \varphi < 0$ [19].

г) калибровка вида $\mathbf{A} = \text{grad} \psi$ ($\text{div} \mathbf{A} \neq 0$) описывает потенциальное (безвихревое) векторное поле \mathbf{A} , так как выполняется тождество $\mathbf{A} = \text{rot}(\text{grad} \psi) \equiv 0$ [17, с.179], при этом из второго уравнения системы (3) следует, что

$$\frac{\partial \psi}{\partial \tau} + \varphi = f(\tau),$$

где $f(\tau)$ – произвольная функция безразмерного времени. Подстановка этого равенства в первое уравнение системы (3) преобразовывает его в неоднородное уравнение Даламбера

$$\square \psi = -f'(\tau).$$

Кватернион $\Phi(\mathbb{R}, \mathbb{R}^*)$, удовлетворяющий уравнению Даламбера

$$\square \Phi(R, R^*) = 0, \quad (19)$$

будем называть *гипергармоническим*. С точки зрения теории Максвелла гипергармоническая функция определяет локальные области, в которых отсутствуют «заряды» и «токи». В этих клетках скалярный и векторный потенциалы задаются периодическими во времени и по пространству функциями, которые могут формировать в синергетических системах периодические структуры Тьюринга [20].

3. КВАТЕРНИОН ПЛОТНОСТИ ЭНЕРГИИ В НЕПОДВИЖНОЙ ЦЕЛЛЕ

Произведение плотности «заряда» (13) $Q(R, R^*)$ на гиперкомплексный потенциал $\Phi(R, R^*)$ задает плотность энергии поля $W = Q\Phi$, при этом ее скалярная и векторная части равны

$$\text{Sc}(W) = w = \rho\varphi + \mathbf{j} \cdot \mathbf{A}, \quad (20)$$

$$\text{Ve}(W) = \mathbf{W} = \rho \mathbf{A} + \varphi \mathbf{j} - [\mathbf{j} \times \mathbf{A}]. \quad (21)$$

Согласно формуле (47) из [16], гипераналитичность кватернионов Q и Φ ($\diamond Q = 0$, $\diamond \Phi = 0$, см. условия (3)) не определяет гипераналитичность функции W , т.е.

$$\diamond W = \diamond(Q\Phi) = \{\diamond Q\Phi + Q(\diamond \Phi) + Q_{\Delta}(W)\}_{\diamond Q=0, \diamond \Phi=0} = Q_{\Delta}(W), \quad (22)$$

где дефект кватернионной производной по [16] равен:

$$Q_{\Delta}(W) = \mathbf{j} \cdot \text{rot } \mathbf{A} + \gamma \{ [(-\nabla \varphi + [\mathbf{A} \times \nabla]) \times \mathbf{j}] \}. \quad (23)$$

С учетом правила (4) из [15] и формулы (2) из [16] равенство (23) принимает вид:

$$Q_{\Delta}(W) = \mathbf{j} \cdot \text{rot } \mathbf{A} + \gamma \{ [\mathbf{j} \times \nabla \varphi] + [\mathbf{A} \times \text{rot } \mathbf{j}] + \mathbf{Z} \}, \quad (24)$$

где вектор $\mathbf{Z} = (\mathbf{A} \cdot \nabla) \mathbf{j} - \mathbf{A} \text{ div } \mathbf{j}$. Следовательно, клетка с «зарядом» Q в кватернионном поле Φ обладает гиперкомплексным градиентом плотности энергии $\diamond W|_{\diamond Q=0, \diamond \Phi=0} = \mathbf{g} + \gamma \mathbf{G}$:

$$\text{Sc}(\diamond W)|_{\diamond Q=0, \diamond \Phi=0} = \mathbf{g} = \mathbf{j} \cdot \text{rot } \mathbf{A}, \quad (25)$$

$$\text{Ve}(\diamond W)|_{\diamond Q=0, \diamond \Phi=0} = \mathbf{G} = [\mathbf{j} \times \nabla \varphi] + [\mathbf{A} \times \text{rot } \mathbf{j}] + \mathbf{Z}. \quad (26)$$

Используя формулу (18), определение (24) из [15], формулы (42)-(46) из [16] и условия (3), запишем первое слагаемое в (24) в виде

$$g = \frac{1}{8} \{ \langle (Q, \diamond, \Phi^*) \rangle + \langle (Q, \diamond^*, \Phi) \rangle + \langle (Q^*, \diamond, \Phi) \rangle + \langle (Q^*, \diamond^*, \Phi^*) \rangle \} =$$

$$= \frac{1}{8} \{ (Q \diamond^* + Q^* \diamond) \Phi + (Q \diamond + Q^* \diamond^*) \Phi^* - ((\diamond^* \Phi)^* + (\diamond \Phi^*)^*) Q \} \quad (27)$$

Согласно формулам (18) из [15] и (37) из [16] выражение

$$\gamma [\mathbf{j} \times \nabla \varphi] = \frac{1}{4} \{ [(\diamond \Phi), Q] + [(\diamond \Phi^*), Q] \} = \frac{1}{4} [(\diamond \Phi^*), Q] = \frac{1}{4} \{ (\diamond \Phi^*) Q - (\diamond \Phi^*)^* Q^* \} \quad (28)$$

Третье слагаемое (24) по формулам (18) из [15] и (39) из [16] равно

$$\gamma [A \times \text{rot} j] = -\frac{1}{4} \{ [(\diamond Q), \Phi] + [(\diamond Q^*), \Phi] \} =$$

$$= -\frac{1}{4} [(\diamond Q^*), \Phi] = \frac{1}{4} \{ (\diamond Q^*)^* \Phi^* - (\diamond Q^*) \Phi \} \quad (29)$$

Величина (с учетом определения (23) из [15])

$$\gamma \mathbf{Z} = \frac{1}{2} [(\Phi, \diamond, Q)] = \frac{1}{2} \{ (\Phi \diamond) Q - \Phi (\diamond Q) \} = \frac{1}{2} (\Phi \diamond) Q \quad (30)$$

представляет собой произведение числа на локальную гиперкомплексную производную по направлению кватерниона потенциала Φ от кватерниона плотности распределения «заряда» Q . Формулы (27)-(30) демонстрируют связь особенностей дифференциального исчисления кватернионов и физических свойств локальной области при отсутствии гиперкомплексных градиентов плотности распределения «заряда» Q и потенциала поля Φ .

При условии гипераналитичности функций Q и Φ дефект гиперкомплексной производной от плотности энергии W равен нулю ($Q_{\Delta}(W) = 0$), например, в таких случаях:

а) если выражение (30) равно нулю ($\mathbf{Z} = 0$). Рассмотрим некоторые частные случаи обращения вектора \mathbf{Z} в нуль:

– $\mathbf{Z} = 0$: $\begin{cases} \mathbf{A} = 0 \\ \mathbf{j} = 0 \end{cases}$, в локальной области наблюдается стационарное

распределение плотности «зарядов», при наличии внешнего «электрического» поля (см. систему (4)) его напряженность противоположна по направлению градиенту скалярного потенциала кватернионного поля φ , дефект кватернионной производной (24) равен нулю и кватернион плотности энергии описывается гипераналитической функцией;

– $\mathbf{Z} = 0$: $\begin{cases} \mathbf{A} \neq 0 \\ \mathbf{j} = 0 \end{cases}$, при наличии внешнего поля стационарное распределение

плотности «зарядов» поддерживается «электрическим» и «магнитным» полями, дефект кватернионной производной (24) равен нулю и кватернион плотности энергии описывается гипераналитической функцией;

– $\mathbf{Z} = 0$: $\begin{cases} \mathbf{A} = 0 \\ \mathbf{j} \neq 0 \end{cases}$, при наличии внешнего поля ему противодействует

градиент стационарного скалярного потенциала, дефект кватернионной производной (24) отличен от нуля и кватернион плотности энергии не описывается гипераналитической функцией;

– $\mathbf{Z} = 0$: $\begin{cases} \mathbf{A} \neq 0 \\ \mathbf{j} \neq 0 \end{cases}$, выполняется равенство $(\mathbf{A} \cdot \nabla) \mathbf{j} = \mathbf{A} \operatorname{div} \mathbf{j}$ и пусть

плотность «тока» \mathbf{j} перпендикулярна «магнитному» полю (6) ($\mathbf{j} \perp \mathbf{E}_2$, величина (27) обращается в нуль), тогда по Теореме 5 из [16] компланарность векторов \mathbf{j} , \mathbf{A} и $\operatorname{rot} \mathbf{j}$ (или \mathbf{j} , \mathbf{A} и $\nabla \varphi$, или \mathbf{j} , $\nabla \varphi$ и $\operatorname{rot} \mathbf{j}$, или \mathbf{A} , $\nabla \varphi$ и $\operatorname{rot} \mathbf{j}$) определяет обращение в нуль формулы (26), т.е. перпендикулярность соответствующих векторов к полю \mathbf{G} . В этом случае дефект кватернионной производной (24) равен нулю и кватернион плотности энергии описывается гипераналитической функцией;

б) если выражение (30) не равно нулю ($\mathbf{Z} \neq 0$) и плотность «тока» \mathbf{j} перпендикулярна «магнитному» полю (6) ($\mathbf{j} \perp \mathbf{E}_2$, величина (27) обращается в нуль), то объем параллелепипеда, построенного на векторах \mathbf{j} , \mathbf{A} и $\operatorname{rot} \mathbf{j}$ (или \mathbf{j} , \mathbf{A} и $\nabla \varphi$, или \mathbf{j} , $\nabla \varphi$ и $\operatorname{rot} \mathbf{j}$, или \mathbf{A} , $\nabla \varphi$ и $\operatorname{rot} \mathbf{j}$), в случае нулевого дефекта кватерни-

онной производной будет равен

$$\mathbf{j} \cdot [\mathbf{A} \times \text{rot } \mathbf{j}] = \mathbf{j} \cdot \mathbf{Z} \quad (31)$$

(или

$$\mathbf{A} \cdot [\mathbf{j} \times \nabla \varphi] = \mathbf{A} \cdot \mathbf{Z} \quad , \quad (32)$$

$$\text{rot } \mathbf{j} \cdot [\mathbf{j} \times \nabla \varphi] = \text{rot } \mathbf{j} \cdot \mathbf{Z} \quad , \quad (33)$$

$$\nabla \varphi \cdot [\mathbf{A} \times \text{rot } \mathbf{j}] = \nabla \varphi \cdot \mathbf{Z} \quad). \quad (34)$$

Отличие объемов параллелепипедов (31)-(34) от правых частей указанных соотношений указывает на наличие кватернионного градиента плотности энергии, т.е. на то, что функция W не является гипераналитической. Таким образом, произведение двух гипераналитических функций не является гипераналитическим, если дефект кватернионной производной отличен от нуля.

4. СУБСТАЦИОНАЛЬНОЕ УРАВНЕНИЕ СОХРАНЕНИЯ ПЛОТНОСТИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ «ЗАРЯДА». СИЛЫ В КВАТЕРНИОННОМ ПОЛЕ

Если плотность распределения «заряда» (13) описывается гипераналитической функцией, то выполняются условия вида (3):

$$\diamond Q = 0: \begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial \tau} + \text{div } \mathbf{j} = 0 \\ \frac{\partial \mathbf{j}}{\partial \tau} + \text{grad } \rho - \text{rot } \mathbf{j} = 0 \end{cases} \quad (35)$$

Если центр масс локальной области движется со скоростью \mathbf{u} , но остаются неизменными условия (35), то первое уравнение (35) можно переписать в виде

$$\frac{d\rho}{d\tau} + \text{div } \mathbf{J} = -\rho \text{div } \mathbf{u} \quad , \quad (36)$$

здесь $\frac{d}{d\tau} = \frac{\partial}{\partial \tau} + \mathbf{u} \cdot \nabla$ – субстациональная производная по времени, $\mathbf{J} = \mathbf{j} - \rho \mathbf{u}$ – субстациональная плотность «тока», равная разности векторов истинной плотности «тока» \mathbf{j} и конвективной

компоненты $\rho \mathbf{u}$. Для несжимаемой среды ($\operatorname{div} \mathbf{u} = 0$) субстанциональное уравнение сохранения плотности распределения «заряда» (36) принимает вид:

$$\frac{d\rho}{d\tau} + \operatorname{div} \mathbf{J} = 0. \quad (37)$$

Если в среде отсутствует «ток» ($\mathbf{j} = 0$), но присутствует конвективное перемещение «заряда», то субстанциональная плотность «заряда»

$$\mathbf{J} = -\rho \mathbf{u}. \quad (38)$$

Силу, действующую на движущийся «заряд» в кватернионном поле вида (4), определим формулой ($Q = \rho + \gamma \mathbf{J}$):

$$\mathbf{F} = Q\mathbf{E} = -Q \diamond \Phi = \mathbf{J} \cdot \mathbf{E} + \gamma(\rho \mathbf{E} - [\mathbf{J} \times \mathbf{E}]), \quad (39)$$

где скалярная часть кватерниона (39) определяет скорость диссипации энергии

$$\frac{d\varepsilon}{d\tau} = \mathbf{J} \cdot \mathbf{E}, \quad (40)$$

а векторная – силу, действующую на «заряд»:

$$\mathbf{F} = \rho \mathbf{E} - [\mathbf{J} \times \mathbf{E}]. \quad (41)$$

Из формулы (40) следует, что рассеяние энергии локальной областью не происходит при отсутствии внутри нее «тока» ($\mathbf{J} = 0$), а при его наличии – при перпендикулярности плотности «тока» \mathbf{J} вектору напряженности внешнего поля \mathbf{E} ($\mathbf{J} \perp \mathbf{E}$). При коллинеарности плотности «тока» \mathbf{J} вектору напряженности «электрического» поля \mathbf{E}_1 ($\mathbf{J} \parallel \mathbf{E}_1$) из правой части равенства (41) исчезает вычитаемое $[\mathbf{J} \times \mathbf{E}_1]$. В этом случае указанные величины связаны соотношением

$$\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}_1, \quad (42)$$

где σ – коэффициент пропорциональности. Если стационарное векторное поле \mathbf{A} не изменяется от точки к точке локальной области, то выражение (42) описывает закон Ома, записанный в дифференциальной форме [22, с.14], а коэффициент σ – электропроводность среды.

С учетом введенных определений и при выполнении (42) равенство (41) запишется в виде

$$\mathbf{F} = \rho \mathbf{E}_1 + \rho [\mathbf{u} \times \mathbf{E}_2] + \rho \mathbf{E}_2 - [\mathbf{j} \times \mathbf{E}_2]. \quad (43)$$

Если выполняется равенство

$$\rho \mathbf{E}_2 - [\mathbf{j} \times \mathbf{E}_2] = 0, \quad (44)$$

то соотношение (43) является стандартным выражением для силы, действующей на «заряд» в «электрическом» и «магнитном» полях, причем второе слагаемое описывает силу Лоренца

$$\mathbf{F}_L = \rho [\mathbf{u} \times \mathbf{E}_2]. \quad (45)$$

Таким образом, стандартное выражение для силы, действующей на «заряд» в «электрическом» и «магнитном» полях, возникает тогда, когда происходит конвективное перераспределение «заряда», выполняется дифференциальный закон Ома и справедливо выражение (44).

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Условия гипераналитичности кватернионных функций в некоторой локальной области позволяет устранить неопределенность в определении полевых потенциалов (первое уравнение условий определяет калибровку полевых потенциалов) и приводят к уравнениям моделей Максвелла, Кулона, Пуассона и Лапласа. Исследование гипераналитичности произведения двух гипераналитичных кватернионов Гамильтона-Гиббса позволило связать некоммутативность и неассоциативность дифференциального гиперисчисления с физическими величинами системы. Следует отметить, что помимо стандартных сил (напр., сила Лоренца) в кватернионном поле на «заряд» действуют дополнительные силы. Таким образом, применение гиперкомплексного исчисления к описанию физических объектов позволяет получить не только известные из эксперимента и теории соотношения, но и установить целый ряд новых связей между характеристиками системы.

1. *Ф.М. Диментберг*, Винтовое счисление и его приложения в механике, Наука, Москва (1965).
 2. *В.Н. Березин, Ю.А. Курочкин, Е.А. Толкачев*, Кватернионы в релятивистской физике, Наука, Минск (1989).
 3. *P.S. Bisht, O.P. Negi, B.S. Rajput*, Progr. Theor. Phys. **85**, 1, 157 (1991).
 4. *А.О. Ватульян*, Соросовский образовательный журнал, № 5, 117 (1999).
 5. *A.P. Yefremov*, Gravitation & Cosmology **7**, 4, 273 (2001).
 6. *С.В. Терехов*, Вісник Донецького національного університету, Сер. А: Природничі науки, № 2, 287 (2002).
 7. *А.П. Ефремов*, Гиперкомплексные числа в геометрии и физике **1**, 111 (2004).
 8. *С.В. Терехов*, Вестник Новгородского государственного университета, № 26, 56 (2004).
 9. *С.В. Терехов*, Вісник Донецького національного університету, Сер. А: Природничі науки № 2, 162 (2008).
 10. *А.А. Элиович, В.И. Санюк*, Вестник РУДН. Серия Математика. Информатика. Физика, № 2 (1), 79 (2010).
 11. *Ю.Н. Челноков*, Кватернионные модели и методы динамики, навигации и управления движением, Физматлит, Москва (2011).
 12. *В.И. Крылов, С.Н. Яшкин*, Известия высших учебных заведений. Геодезия и аэрофотосъемка, № 6, 3 (2016).
 13. *Л. де Бройль*, Революция в физике. Новая физика и кванты, Госатомиздат, Москва (1963).
 14. *Дж.К. Максвелл*, Избранные сочинения по теории электромагнитного поля, Гос. изд. техн.-теор. лит., Москва (1952).
 15. *С.В. Терехов*, ФТВД **25**, № 1-2, 5 (2015).
 16. *С.В. Терехов*, ФТВД **26**, № 1-2, 106 (2016).
 17. *А.И. Борисенко, И.Е. Тарапов*, Векторный анализ и начала тензорного исчисления, Высшая школа, Москва (1966).
-

18. А.В. Астахов, Ю.М. Широков, Электромагнитное поле, Наука, Москва (1980).
19. Ф.М. Морс, Г. Фейшбах, Методы теоретической физики. Т.1, Иностранная литература, Москва (1958).
20. С.В. Терехов, ФТВД **22**, № 1, 33 (2012).
21. С.В. Терехов, ФТВД **25**, № 3-4, 112 (2015).
22. А.А. Власов, Макроскопическая электродинамика, Физматлит, Москва (2005).

Terekhov S.V.

PHYSICS-GEOMETRICAL DESCRIPTIONS OF HYPERSPACE. V. FIELD OF HYPERDOUBLE QUATERNIONS

The quaternion field of hypercomplex structures of Hamilton-Gibbs is investigational with different calibrations, laid on scalar and vectorial to part of potential. It is shown that at affecting immobile local area of the external field with a zero scalar part, there can be one or another fields, related to different behavior of vectorial potential. For example, absence of substancial gradient of the quaternion field results in imposition on potentials of Lorenz calibration and appearance of the Maxwell electromagnetic field. Connection of features of quaternion differential calculation is found with physical descriptions for the hyperanalytical closeness of energy of the quaternion field. It is set that work of two hyperanalytical quaternions is not described by a hyperanalytical function, if the defect of quaternion derivative is excellent he zero. It is shown that besides standard forces (e.g., Lorenz force) on a «charge» additional forces operate in the quaternion field.

Keywords: local area, quaternion, hyperanalyticity, closeness of distribution of «charges», closeness of «current», scalar and vectorial potentials.

44. Физика и техника высоких давлений.

Донецк, 2018, т. 28, № 2, с. 74-80

PACS numbers: 02.10.De; 02.30.Tb; 45.20.-d; 45.50.-j

Терехов С.В.

**ФИЗИКО-ГЕОМЕТРИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ
ГИПЕРПРОСТРАНСТВА. VI. ЗАКОН СОХРАНЕНИЯ
ФИЗИЧЕСКОЙ ВЕЛИЧИНЫ И ЗАКОН ИЗМЕНЕНИЯ
ЕЕ ПОТОКА**

Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина
ул. Р. Люксембург, 72, Донецк, 83114

Рукопись поступила в редакцию 25 декабря 2017 года

Исследована взаимосвязь кинетического и динамического уравнений, определяющих условия гипераналитичности кватерниона Гамильтона-Гиббса. Выявлены случаи субстанционального и локального сохранения скалярной составляющей этой гиперкомплексной функции. Показано, что при установленных в работе ограничениях на вид потока физической величины, априори выполняются законы Фика, Фурье и им подобные.

Ключевые слова: локальная область, кватернион, гипераналитичность, закон сохранения, поток, стационарность

**1. ВВЕДЕНИЕ: ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ
ХАРАКТЕРИСТИК ФИЗИЧЕСКИХ ВЕЛИЧИН**

Отсутствие внешнего воздействия на локальную область (*целлу*) сопровождается сохранением той или иной характеристики физического объекта, причем наблюдается идентичность вида законов сохранения. Приведем ряд примеров:

а) калибровка Лоренца [1, с.228]

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{A} = 0, \quad (1)$$

где φ и \mathbf{A} – скалярный и векторный потенциалы электромаг-

нитного поля, t – время. Если отсутствует расходимость векторного поля \mathbf{A} ($\operatorname{div} \mathbf{A} = 0$), то уравнение (1) соответствует *локальному закону сохранения* скалярной функции φ ($\partial\varphi/\partial t = 0$). Если векторная функция \mathbf{A} отвечает за конвективный перенос скалярного потенциала ($\mathbf{A} = \varphi \mathbf{u}$, \mathbf{u} – скорость перемещения центра масс целлы в локальной точке в выбранный момент времени t), то для несжимаемой среды ($\operatorname{div} \mathbf{u} = 0$) уравнение (1) описывает *субстанциональный закон сохранения* потенциала φ ($d\varphi/dt = 0$). Если векторная функция \mathbf{A} задает потенциальное поле ($\mathbf{A} = -\alpha \nabla \varphi$, $\operatorname{rot} \mathbf{A} = 0$, α – постоянный коэффициент пропорциональности), то уравнение (1) определяет *дифференциальный закон сохранения* скалярной функции φ .

б) *закон сохранения заряда* [2, с.36]

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j} = 0, \quad (2)$$

где ρ – объемная плотность электрического заряда, t – время, \mathbf{j} – плотность тока;

в) *закон сохранения массы* [3, с.10]

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \rho \mathbf{u} = 0, \quad (3)$$

здесь ρ – плотность вещества, \mathbf{u} – массовая скорость в данной точке в момент времени t ;

г) *уравнение неразрывности (уравнение Фоккера-Планка)* [3, с.53]

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j} = 0, \quad (4)$$

здесь w – плотность вероятности, \mathbf{j} – поток частиц в момент времени t ;

д) *модель Шредингера* [4, с.124]

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{J} = 0, \quad (5)$$

где распределение вероятности $P = \Psi \cdot \Psi^*$ задается волновой функцией Ψ , а поток в локальной точке в момент времени t ра-

вен $\mathbf{J} = \text{Re} \left[\Psi^* \frac{\hbar}{i m} \nabla \Psi \right]$ (\hbar – приведенная постоянная Планка, i – мнимая единица, m – масса частицы).

Несмотря на разное физическое содержание величин (1)-(5), все они удовлетворяют одному и тому же уравнению. Это уравнение является одним из условий, определяющих локальную гипераналитичность кватерниона Гамильтона-Гиббса

$$F(\tau, \mathbf{r}) = f(\tau, \mathbf{r}) + \gamma \frac{\mathbf{F}(\tau, \mathbf{r})}{V_0}$$

(см. формулу (10) из [5, с.108]), которые запишем в размерных единицах:

$$\diamond F = 0 : \begin{cases} \frac{\partial f}{\partial t} + \text{div} \mathbf{F} = 0 \\ \frac{1}{V_0^2} \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial t} + \text{grad} f - \frac{1}{V_0} \text{rot} \mathbf{F} = 0 \end{cases}, \quad (6)$$

где $\tau = \frac{V_0 t}{L_0}$ и $\mathbf{r} = \frac{\mathbf{r}}{L_0}$ – безразмерные время и радиус-вектор положения центра тяжести локальной области; L_0 и V_0 – характерный размер и скорость для исследуемой задачи (в последующих формулах длину L_0 и скорость V_0 положим равными единице); f и \mathbf{F} скалярная и векторная составляющие кватерниона F . Легко показать, что функции f и \mathbf{F} удовлетворяют уравнениям

$$\square f = 0, \quad (7)$$

$$\square \mathbf{F} = -2 \text{rot}(\text{rot} \mathbf{F}). \quad (8)$$

($\square = \Delta - \frac{\partial^2}{\partial t^2}$ – оператор Даламбера, $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ – оператор Лапласа).

Если вектор-функция \mathbf{F} задает потенциальное (безвихревое) векторное поле, т.е.

$$\text{rot} \mathbf{F} = 0$$

($\mathbf{F} = \text{grad} \phi$, так как $\text{rot}(\text{grad} \phi) \equiv 0$ [1, с.179], ϕ – произвольный скалярный потенциал), то кватернион F удовлетворяет уравне-

нию Даламбера (формула (19) из [6]), т.е. является *гипергармоническим*.

Система уравнений (6) содержит два уравнения: первое из них соответствует выполнению закона сохранения скалярной функции f , а второе – задает изменение потока этой функции. Определенный интерес представляют случаи априорного выполнения второго уравнения системы (6), которым соответствуют классические модели Фика, Фурье и им подобные кинетические теории. Поэтому целью данной работы является выявление вариантов не только локального или субстанционального сохранения функции f , но и обращения второго уравнения системы (6) в тождество. Это позволит выяснить границы применимости вышеуказанных построений.

2. СУБСТАЦИОНАЛЬНОЕ СОХРАНЕНИЕ СКАЛЯРНОЙ СОСТАВЛЯЮЩЕЙ КВАТЕРНИОНА

Если центр масс целлы движется со скоростью \mathbf{u} , то умножив скалярно эту скорость на второе уравнение (6) и прибавив результат к первому уравнению, получим соотношение для субстанциональной производной по времени $\frac{df}{dt}$ от скалярной функции f :

$$\frac{df}{dt} = \mathbf{u} \cdot \left(\text{rot} \mathbf{F} - \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial t} \right) - \text{div} \mathbf{F}. \quad (9)$$

При обращении в нуль правой части уравнения (9) величина f остается неизменной в каждый момент времени в любой точке исследуемого объекта.

Рассмотрим ряд частных случаев субстанционального сохранения скалярной составляющей кватерниона \mathbf{F} , когда выполняется равенство:

$$\mathbf{u} \cdot \left(\text{rot} \mathbf{F} - \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial t} \right) - \text{div} \mathbf{F} = 0. \quad (10)$$

1. Пусть $\mathbf{u} \neq 0$, $\text{rot} \mathbf{F} - \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial t} \neq 0$, $\mathbf{u} \perp \left(\text{rot} \mathbf{F} - \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial t} \right)$ и $\text{div} \mathbf{F} \neq 0$, тогда

уравнение (10) служит для определения векторного поля \mathbf{F} :

а) *потенциальное (безвихревое)* векторное поле \mathbf{F} , т.е.

$$\operatorname{rot} \mathbf{F} = 0$$

($\mathbf{F} = \operatorname{grad} \phi$, так как $\operatorname{rot}(\operatorname{grad} \phi) \equiv 0$ [1, с.179], ϕ – произвольный скалярный потенциал), равенство (10) принимает вид уравнения Пуассона [7, с.56]:

$$\Delta \phi = -\mathbf{u} \cdot \nabla \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right), \quad (11)$$

Следовательно, правую часть уравнения (11) можно трактовать как плотность ρ некоторых «зарядов» (в единицах системы СГС):

$$\rho = \frac{1}{4\pi} \mathbf{u} \cdot \nabla \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right), \quad (12)$$

Если целла покоится ($\mathbf{u} = 0$) или скорость движения ее центра масс перпендикулярна градиенту скорости изменения скалярного потенциала ($\mathbf{u} \perp \nabla \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)$), то внутри локальной области «заряды» отсутствуют. В том случае, когда вектор \mathbf{F} является потоком величины f ($\mathbf{F} = -\gamma \operatorname{grad} f$, γ – постоянный кинетический коэффициент, т.е. $\phi = -\gamma f$), перемещение целлы порождает внутри нее «заряды» с плотностью

$$\rho = -\frac{\gamma}{4\pi} \mathbf{u} \cdot \nabla \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right), \quad (13)$$

(кинетический коэффициент $\gamma > 0$) причем эти «заряды» противоположны по знаку величине $\mathbf{u} \cdot \nabla \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)$;

б) *стационарное* векторное поле \mathbf{F} ($\partial \mathbf{F} / \partial t = 0$, т.е. векторная функция \mathbf{F} явно не зависит от времени t и является функцией только пространственных переменных). Из второго уравнения системы (6) имеем $\operatorname{rot} \mathbf{F} = \operatorname{grad} f$ и уравнение (10) принимает вид:

$$\mathbf{u} \cdot \operatorname{grad} f - \operatorname{div} \mathbf{F} = 0 \quad (14)$$

или

$$f \operatorname{div} \mathbf{u} + \operatorname{div}(\mathbf{F} - f \mathbf{u}) = 0. \quad (15)$$

При конвективном переносе величины $f \neq 0$ ее поток равен $\mathbf{F} = f \mathbf{u}$, поэтому уравнение (15) сводится к условию несжимаемости локальной области, т.е.

$$\operatorname{div} \mathbf{u} = 0. \quad (16)$$

2. *Соленоидальное* векторное поле с калибровкой Кулона $\operatorname{div} \mathbf{F} = 0$ ($\mathbf{F} = \operatorname{rot} \mathbf{W}$, [1, п.4.10], \mathbf{W} – произвольное векторное поле, при этом $\operatorname{div}(\operatorname{rot} \mathbf{W}) \equiv 0$; отметим, что по первому уравнению системы (6) имеет место локальное сохранение скаляра f):

– *неподвижная целла* ($\mathbf{u} = 0$);

– *подвижная локальная область* ($\mathbf{u} \neq 0$):

а) выполняется равенство

$$\operatorname{rot} \mathbf{F} - \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial t} = 0. \quad (17)$$

Если искать общее решение этого уравнения методом разделения переменных [8, с.133], то получим решение вида

$$\mathbf{F}(t, \mathbf{r}) = \mathbf{G}(\mathbf{r}) \exp(\lambda t),$$

а векторная функция $\mathbf{G}(\mathbf{r})$ удовлетворяет уравнению $\operatorname{rot} \mathbf{G} = \lambda \mathbf{G}$.

Это уравнение разрешимо [8, с.44], так как из $\operatorname{div} \mathbf{F} = 0$ следует $\operatorname{div} \mathbf{G} = 0$. Используя теорему Стокса [8, с.21] (контур C ограничивает ориентированную поверхность $S = S_{\mathbf{n}}$, \mathbf{n} – нормаль к поверхности), получим

$$\int_S \operatorname{rot} \mathbf{G} \cdot d\mathbf{S} = \oint_C \mathbf{G} \cdot d\mathbf{r} = \lambda \int_S \mathbf{G} \cdot d\mathbf{S} = \lambda \int_S \mathbf{G} \cdot \mathbf{n} dS = \lambda \int_S G_n dS. \quad (18)$$

Формула (18) показывает, что циркуляция вектора $\mathbf{G}(\mathbf{r})$ по контуру C определяется проекцией векторного поля $\mathbf{G}(\mathbf{r})$ на нормальный вектор \mathbf{n} ;

б) поле Лапласа ($\operatorname{rot} \mathbf{F} = 0 \Rightarrow \mathbf{F} = \operatorname{grad} \phi$ ($\operatorname{rot}(\operatorname{grad} \phi) \equiv 0$), где ϕ – произвольный скалярный потенциал, и так как $\operatorname{div} \mathbf{F} = 0$, то выполняется уравнение Лапласа $\Delta \phi = 0$), тогда равенство

$$\mathbf{u} \cdot \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial t} = 0 \quad (19)$$

означает взаимную перпендикулярность этих векторов, т.е. движение локальной области осуществляется перпендикулярно к

векторным линиям поля скорости изменения вектора \mathbf{F} . Если вектор \mathbf{F} не изменяется с течением времени, то уравнение (9) обращается в тождество;

в) перпендикулярность векторов $\mathbf{u} \perp \left(\text{rot} \mathbf{F} - \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial t} \right) = \text{grad} f$. Иная форма записи этого условия имеет вид:

$$f \text{ div} \mathbf{u} - \text{div} (f \mathbf{u}) = 0. \quad (20)$$

Из уравнения (20) следует, что в несжимаемой среде ($\text{div} \mathbf{u} = 0$) конвективный поток ($f \mathbf{u}$) является вихрем ($f \mathbf{u} = \text{rot} \mathbf{Q}$, \mathbf{Q} – произвольное векторное поле, $\text{div}(\text{rot} \mathbf{Q}) \equiv 0$).

3. КИНЕТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ФИКА, ФУРЬЕ И ИМ ПОДОБНЫЕ (ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЕ СОХРАНЕНИЕ СКАЛЯРНОЙ СОСТАВЛЯЮЩЕЙ КВАТЕРНИОНА)

Согласно первому закону Фика (см., напр., [9, с.8]) диффузионный поток \mathbf{j} связан с градиентом концентрации вещества $\nabla c = \text{grad} c$ соотношением:

$$\mathbf{j} = -D \nabla c, \quad (21)$$

где D – коэффициент диффузии, размерность которого в международной системе СИ – m^2/sec . Закон теплопроводности по Фурье (см., напр., формулу (1.2.10а) из [10, с.18]) содержит поток тепла \mathbf{j}_T , который описывается формулой:

$$\mathbf{j}_T = -k \nabla \theta, \quad (22)$$

здесь k – коэффициент теплопроводности, $\nabla \theta$ – градиент температуры θ .

В общем случае кинетические коэффициенты указанных и им подобных необратимых процессов зависят от местоположения точки в среде при заданном моменте времени. Таким образом, в *безразмерных величинах* кинетические явления этого класса характеризуются следующей зависимостью между векторной и скалярной составляющими кватерниона:

$$\mathbf{F} = -\gamma \nabla f \quad (23)$$

(γ – переменный кинетический коэффициент). Следует заме-

титель, что зависимость коэффициента γ от времени и пространственных аргументов задается механизмом протекания процесса.

С учетом того, что $\text{rot}(\nabla f) \equiv 0$, второе уравнение системы (6) является уравнением для определения функции $\nabla f = \mathbf{g}$ при известной зависимости коэффициента γ от пространственно-временных координат:

$$\left(1 - \frac{\partial \gamma}{\partial t}\right) \mathbf{g} - \gamma \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial t} + [\nabla \gamma \times \mathbf{g}] = 0. \quad (24)$$

После подстановки

$$\mathbf{g} = \mathbf{z}(t, \mathbf{r}) \exp\left(\int_0^t \frac{1}{\gamma} \left(1 - \frac{\partial \gamma}{\partial t}\right) dt\right). \quad (25)$$

уравнение (24) принимает вид ($\nabla(\ln \gamma) = \mathbf{h}$):

$$\gamma \frac{\partial \mathbf{z}}{\partial t} = [\nabla \gamma \times \mathbf{z}] \Rightarrow \frac{\partial \mathbf{z}}{\partial t} = [\nabla(\ln \gamma) \times \mathbf{z}] \Rightarrow \frac{\partial \mathbf{z}}{\partial t} = [\mathbf{h} \times \mathbf{z}]. \quad (26)$$

В проекциях векторное уравнение (26) эквивалентно системе уравнений

$$\begin{cases} \frac{\partial z_1}{\partial t} = h_2 z_3 - h_3 z_2 \\ \frac{\partial z_2}{\partial t} = h_3 z_1 - h_1 z_3 \\ \frac{\partial z_3}{\partial t} = h_1 z_2 - h_2 z_1 \end{cases}, \quad (27)$$

которое аналогично системе уравнений (1) из [11] и ее анализ приведен там же. Поэтому здесь рассмотрим лишь частные случаи явного обращения уравнения (26) в тождество. Они априори приводят к решению второго уравнения системы (6) в виде законов Фика, Фурье и им подобных (выражение (23)):

1. Стационарность вектора \mathbf{z} (отсутствие явной зависимости этого векторного поля от времени, т.е. $\partial \mathbf{z} / \partial t = 0$) и его коллинеарность градиенту логарифма кинетического коэффициента ($[\mathbf{h} \times \mathbf{z}] = 0 \Rightarrow \mathbf{z} \parallel \mathbf{h}$, могут быть направленными в одну или противоположные стороны).

2. Стационарность вектора \mathbf{z} и зависимость кинетического коэффициента γ только от времени ($\gamma = \gamma(t)$, $\mathbf{h} \equiv 0$).

3. Стационарность вектора \mathbf{z} и постоянство кинетического коэффициента γ ($\gamma = \text{const}$, $\mathbf{h} \equiv 0$).

Отметим, что в двух последних случаях векторное поле \mathbf{g} представляется произведением двух функций, одна из которых зависит только от времени t , а вторая – только от пространственных координат \mathbf{r} , что является основанием для применения метода разделения переменных.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Универсальность вида для законов сохранения различных физических величин является следствием их кватернионной природы. Рассмотренные типы законов сохранения (локальный, субстанциональный и дифференциальный) реализуются при определенных условиях. Они связаны с формированием того или иного состояния синергетической системы. Особый интерес представляют классические кинетические модели, так как условия их реализации указывают на образование в системе вихревых и других структур. Таким образом, алгебра гипердвойных кватернионов Гамильтона-Гиббса является вспомогательным инструментом для выяснения физической сущности сложных систем.

1. *А.И. Борисенко, И.Е. Тарапов*, Векторный анализ и начала тензорного исчисления, Высшая школа, Москва (1966).

2. *О.И. Фальковский*, Техническая электродинамика, «Лань», Москва (2009).

3. *И.П. Базаров, Э.В. Геворкян, П.Н. Николаев*, Неравновесная термодинамика и физическая кинетика, МГУ, Москва (1989).

4. *А. Мессиа*, Квантовая механика, Т.1, Наука, Москва (1978).

5. *С.В. Терехов*, ФТВД **26**, № 1-2, 106 (2016).

6. С.В. Терехов, ФТВД **27**, № 3, 69 (2017).
7. А.В. Астахов, Ю.М. Широков, Электромагнитное поле, Наука, Москва (1980).
8. В. Босс, Лекции по математике. Т. 11: Уравнения математической физики, «ЛИБРОКОМ», Москва (2009).
9. Б.С. Бокштейн, Диффузия в металлах, «Металлургия», Москва (1978).
10. М. Био, Вариационные принципы в теории теплообмена, Энергия, Москва (1975).
11. С.В. Терехов, ФТВД **26**, № 3-4, 129 (2016).

Terekhov S.V.

**PHYSICS-GEOMETRICAL DESCRIPTIONS OF HYPERSPACE.
VI. LAWS OF MAINTENANCE OF SIZES AND LAW OF CHANGE
OF STREAM**

Intercommunication is investigational kinetic and dynamic equalizations, qualificatory the terms of hyperanalyticity of quaternion of Hamilton-Gibbs. The cases of substancial and local maintenance of scalar constituent of this hypercomplex function are educed. It is shown that at the limitations of stream of physical size set in-process, a priori the laws of Fic, Fourier are executed and them similar to.

Keywords: local area, quaternion, hyperanalyticity, law of maintenance, stream, stationarity

45. Мониторинг. Наука и технологии.
Махачкала, 2017, № 1 (30), с. 51-57

УДК 536.6

Локтионов¹ И.К., Терехов² С.В., Ткач² В.И.

**ТЕПЛОЕМКОСТИ ВАКАНСИОННОЙ И КОРПУСКУЛЯРНОЙ
ПОДСИСТЕМ КОНДЕНСИРОВАННОЙ СРЕДЫ**

¹Донецкий национальный технический университет, Донецк, ДНР

²ГУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина», Донецк, ДНР
e-mail: likk@telenet.dn.ua, svlter@yandex.ru

Предложен термодинамический подход к вычислению теплоемкости при постоянном давлении термодинамической системы в рамках модели с малым числом ограничений, накладываемых на микроскопические параметры корпускул и вакансий. Получено выражение для свободной энергии Гельмгольца и установлены термодинамические соотношения для микроскопических параметров компонентов. Найдены выражения для теплоемкостей корпускулярной и вакансионной подсистем конденсированной среды с фиксированным числом частиц, проведены численные расчеты указанных величин для различных систем. Показано, что характер изменения теплоемкости с температурой существенно зависит от температурной зависимости теплоты, рассчитанной на одну «частицу», а также от величины и знака параметров, входящих в нее.

Ключевые слова: конденсированная среда, вакансия, энергия Гельмгольца, энтропия, внутренняя энергия, теплоемкость, температура.

**HEAT CAPACITY VACANCIES AND CORPUSCULAR
SUBSYSTEMS OF THE CONDENSED ENVIRONMENT**

I.K. Loktionov¹, S.V. Terekhov², V.I. Tkatch²

¹Donetsk national technical university, Donetsk, DPR

²A.A. Galkin Donetsk Physics and Engineering Institute, Donetsk, DPR

The thermodynamics approach for calculations of heat capacity at constant pressure for the thermodynamics system within the framework of the model with the small number of limitations constrained on the microscopic parameters of particles and vacancies is proposed. The expression for the Helmholtz free energy was obtained and the thermodynamics relations for the microscopic parameters of the components were established. The expressions for the

heat capacities of the particle and vacancy subsystems of the condensed medium with the fixed number of particles were found and the numerical calculations of these quantities for the different systems were performed. It has been shown that the heat capacity temperature behavior essentially depends on the temperature dependence of the heat calculated per one "particle" as well as on the values and signs of the parameters involved.

Keywords: condensed medium, vacancy, energy of Helmholtz, entropy, internal energy, heat capacity, temperature.

1. ВВЕДЕНИЕ

Экспериментальные исследования теплоемкости металлических [1] и неметаллических [2, 3] стекол, опаловых матриц [4], мультиферроиков [5], криокристаллов криптона [6], моносилицида кобальта [7], углеродных наноматериалов [8] и других конденсированных сред демонстрируют отклонение получаемых температурных зависимостей от кривых классических моделей Дебая и Эйнштейна [9, с.85] и их модификаций (напр., [10-12]). Теплоемкость:

- стекло испытывает скачок при их нагревании (охлаждении) в области температуры стеклообразного перехода;
- опаловых матриц значительно превышает ее значения, рассчитанные по модели Дебая;
- мультиферроиков, криокристаллов криптона и моносилицида кобальта отображается температурной кривой, которая не только лежит выше классической линии, начиная с некоторой температуры, но и испытывает изгиб в сторону больших значений;
- фуллерита C_{60} в определенном температурном интервале содержит пик.

Перечисленные особенности поведения температурной зависимости теплоемкости материалов указывают на необходимость построения термодинамической модели температурной зависимости теплоемкости конденсированной среды. В этой связи целями данной работы являются: разработка на основе классической термодинамики нового подхода к описанию теп-

лостности конденсированной среды с учетом вакансий, образующих свободный объем; определение термодинамических величин, ответственных за изменение вида температурной кривой теплоемкости; исследование области применимости предложенного теоретического построения с помощью численных расчетов модельных и реальных систем.

Дискретизация объема системы подразумевает его разбиение на N ячеек: N_i мест (каждое из них имеет объем v_i) заняты частицами сорта i (всего в системе k компонентов), а N_0 ограниченных областей (каждая из них имеет объем v_0) – остаются вакантными. Таким образом, объем системы определяется по формуле

$$V = v_0 N_0 + \sum_{i=1}^k v_i N_i = V_0 + V_p, \quad (1)$$

которая использовалась при построении феноменологических моделей разреженной и конденсированной сред [13, 14]. В этих моделях объем системы представлялся в виде совокупности областей с неизменными объемами v_i ($i = 0, 1, \dots, k$), что позволяет говорить о моделях с «жесткими» ячейками всех типов. В представляемой работе, в отличие от [13, 14], объем ячеек может изменяться, а также не используется целый ряд ранее принимаемых ограничений по отношению к корпускулярной (атомарным или молекулярным) и вакансионной подсистемам.

2. СВОБОДНАЯ ЭНЕРГИЯ ГЕЛЬМГОЛЬЦА И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СООТНОШЕНИЯ ДЛЯ МИКРОСКОПИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ КОМПОНЕНТОВ

В качестве независимых аргументов, описывающих состояние k -компонентной среды, выберем числа атомов (молекул) N_i сорта i ($i = 1, \dots, k$) и вакансий N_0 , объем системы V и температуру T . Другими словами, будем считать, что состояние конденсированной системы описывает свободная энергия Гельмгольца. Согласно [13, 14], под конденсированной средой понимается термодинамическая система с малой объемной долей

вакансий ($\nu_0 N_0 / V \ll 1$). В дальнейшем все составляющие системы (корпускулы и вакансии) будем называть «частицами».

Вероятность того, что на каждую «частицу» вида i приходится внутренняя энергия ε_i ($i = 0, 1, \dots, k$), определим формулой Больцмана

$$w_i = \exp(-\beta \varepsilon_i), \quad (2)$$

здесь $\beta = 1/\theta$, $\theta = k_B T$ – температура исследуемого объекта по энергетической шкале, $k_B = 1.3807 \cdot 10^{-23}$ J/K – константа Больцмана. Сумма вероятностей (2) равна единице, следовательно, внутренняя энергия одной вакансии задается температурой системы и внутренними энергиями частиц

$$\varepsilon_0 = -\theta \ln(1 - \sum_{i=1}^k w_i) = -\theta \ln[1 - \sum_{i=1}^k \exp(-\beta \varepsilon_i)]. \quad (3)$$

Перестановка местами тождественных «частиц» не может изменить термодинамическое равновесие системы. При фиксированных внешних условиях вероятности (2) не изменяются от опыта к опыту, поэтому вероятность того, что N_i ячеек заняты частицами сорта i , а N_0 мест остаются вакантными, определяется по схеме Бернулли [15, с.29]:

$$W = N! \prod_{i=0}^k \frac{w_i^{N_i}}{N_i!}. \quad (4)$$

С учетом равенств (2) и (4) свободная энергия Гельмгольца задается классической формулой [14, с.153]

$$F = -\theta \ln W = \varepsilon_0 N_0 + \sum_{i=1}^k \varepsilon_i N_i + \theta \left[N_0 \ln(N_0 / N) + \sum_{i=1}^k N_i \ln(N_i / N) \right] = U - ST, \quad (5)$$

а вакансии выступают в роли дополнительного и равноправного компонента системы.

Из сравнения левой и правой частей в последнем равенстве (5) находим, что внутренняя энергия и энтропия системы удовлетворяют соотношениям вида (1)

$$U = \varepsilon_0 N_0 + \sum_{i=1}^k \varepsilon_i N_i = U_0 + U_p, \quad (6)$$

$$S = s_0 N_0 + \sum_{i=1}^k s_i N_i = S_0 + S_p, \quad (7)$$

где энтропия, приходящаяся на одну «частицу» сорта i , равна

$$s_i = -k_B \ln(N_i / N). \quad (8)$$

Экстенсивность величин (1), (6) и (7) приводит к соотношениям

$$\left\{ \begin{array}{l} dV = \sum_{i=0}^k v_i dN_i \\ N_0 dv_0 = -\sum_{i=1}^k N_i dv_i \end{array} \right\}, \quad (1^*)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} dU = \sum_{i=0}^k \varepsilon_i dN_i \\ N_0 d\varepsilon_0 = -\sum_{i=1}^k N_i d\varepsilon_i \end{array} \right\}, \quad (9)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} dS = \sum_{i=0}^k s_i dN_i \\ N_0 ds_0 = -\sum_{i=1}^k N_i ds_i \end{array} \right\}, \quad (10)$$

т.е. термодинамические величины вакансий определяются коллективной реакцией корпускулярной подсистемы.

В силу того, что объем (1), внутренняя энергия (6) и конфигурационная энтропия (7) являются однородными функциями Эйлера первого порядка по числу «частиц», связь между микроскопическими величинами имеет вид [14, с.148]

$$\varepsilon_i = -Pv_i + s_i T + \mu_i, \quad (11)$$

где P – давление, μ_i – химический потенциал «частиц» сорта i . По теории Гиббса [16] из (11) следует, что

$$d\varepsilon_i = -Pdv_i + Tds_i, \quad (12)$$

$$d\mu_i = v_i dP - s_i dT, \quad (13)$$

причем для равновесных вакансий выполняются соотношения

$$\mu_0 = 0, \quad 0 = v_0 dP - s_0 dT. \quad (14)$$

Второе равенство (14) соответствует уравнению Клапейрона-Клазиуса [17, с. 103–106], что позволяет связать характеристики вакансии с измеряемыми величинами.

Из соотношения (11), записанного для вакансий, и второго равенства (14) получаем

$$\varepsilon_0 = \left(T \cdot \frac{dP}{dT} - P \right) \cdot v_0, \quad (15)$$

$$s_0 = v_0 \frac{dP}{dT}. \quad (16)$$

Для характеристики теплоты, приходящейся на одну «частицу», введем понятие теплоты хаотизации «частиц» сорта i , согласно формуле $q_i = s_i T$ ($i = 0, 1, \dots, k$). Так, из (15) и (16) найдем, что величина, которую будем называть теплотой хаотизации вакансий $q_0 = s_0 T$, равна

$$q_0 = \varepsilon_0 T \frac{dP}{dT} / \left(T \frac{dP}{dT} - P \right). \quad (17)$$

Использование формулы (8) позволяет найти распределение вакансий в виде температурной зависимости их относительной доли

$$x_0 = \frac{N_0}{N_p} = \frac{1}{\exp(\beta q_0) - 1}, \quad (18)$$

и концентрации частиц сорта i ($i \neq 0$)

$$x_i = \frac{N_i}{N_p} = (1 + x_0) \exp(-\beta q_i), \quad (19)$$

здесь $N_p = \sum_{i=1}^k N_i$ – число частиц в системе, $q_i = s_i T$ – теплота хаотизации частиц сорта i . Из (18) видно, что вакансии подчиняются «квантовой» статистике Бозе-Эйнштейна и при определенных условиях могут «сконденсироваться» в одной ячейке. Выполнив суммирование по i в (19) и учтя (18), получим равенство

$$1 - \exp(-\beta q_0) = \sum_{i=1}^k \exp(-\beta q_i). \quad (20)$$

Отсюда вытекает, что вероятность тепловой хаотизации, вносимой в систему «частицей» вида i ($i = 0, 1, \dots, k$), определяется формулой Бернулли

$$p_i = \exp(-\beta q_i). \quad (21)$$

Формула (21) позволяет переписать (18) и (19) в виде

$$x_0 = \frac{p_0}{1 - p_0}, \quad (22)$$

$$x_i = \frac{p_i}{1 - p_0}. \quad (23)$$

Если тепловая хаотизация вакансий незначительна ($p_0 \ll 1$), то относительная доля вакансий x_0 , по (22), и концентрации частиц x_i , по (23), совпадают с соответствующими вероятностями p_i ($i = 0, 1, \dots, k$).

3. ТЕПЛОЕМОСТИ ПОДСИСТЕМ КОНДЕНСИРОВАННОЙ СРЕДЫ С ФИКСИРОВАННЫМ ЧИСЛОМ ЧАСТИЦ N_p

Для такого объекта перепишем первые равенства систем (9) и (10) в виде

$$dU = C_V dT = (C_{Vp} + C_{V0}) dT = \sum_{i=1}^k \varepsilon_i dN_i + \varepsilon_0 dN_0, \quad (24)$$

$$TdS = C_P dT = (C_{Pp} + C_{P0}) dT = T \sum_{i=1}^k s_i dN_i + Ts_0 dN_0, \quad (25)$$

где C_V , C_P – теплоемкости системы при постоянных значениях объема и давления, соответственно; C_{Vp} , C_{Pp} и C_{V0} , C_{P0} – аналогичные теплоемкости для корпускулярной и вакансионной подсистем.

а) Вклад вакансий в теплоемкость системы, по (24) и (25), определяется формулами (в безразмерном виде)

$$\frac{C_{V0}}{k_B N_p} = \varepsilon_0 \frac{dx_0}{d\theta}, \quad (26)$$

$$\frac{C_{P0}}{k_B N_p} = q_0 \frac{dx_0}{d\theta}. \quad (27)$$

Разность величин (27) и (26) задается выражением (при учете (11) и первого равенства (14))

$$\frac{C_{P0} - C_{V0}}{k_B N_p} = -(\varepsilon_0 - q_0) \frac{dx_0}{d\theta} = P_{V0} \frac{dx_0}{d\theta}, \quad (28)$$

а их отношение –

$$\frac{C_{P0}}{C_{V0}} = \frac{q_0}{\varepsilon_0} = \gamma_0, \quad (29)$$

здесь γ_0 – показатель адиабаты для вакансионной подсистемы.

Из формулы (29) с учетом (17) находим, что

$$\gamma_0 = 1 + \frac{Pv_0}{\varepsilon_0} = T \frac{dP}{dT} / \left(T \frac{dP}{dT} - P \right), \quad (30)$$

а разность теплоемкостей

$$C_{P0} - C_{V0} = C_{V0} P / \left(T \frac{dP}{dT} - P \right). \quad (31)$$

Согласно равенству (30), теплоемкости вакансионной подсистемы при постоянных значениях давления или объема совпадают ($\gamma_0 = 1$), если величина Pv_0 значительно меньше, чем внутренняя энергия из расчета на одну вакансию ε_0 ($Pv_0 \ll \varepsilon_0$). Другими словами, для точечных вакансий ($v_0 \approx 0$) показатель адиабаты равен единице. Закон Майера для вакансионной подсистемы выполняется при равенстве правой части соотношения (31) универсальной газовой постоянной $R = 8,314 \text{ J/(mol} \cdot \text{K)}$.

С учетом распределения (18) и формулы (21) из (27) найдем

$$\frac{C_{P0}}{k_B N_p} = \left(\left(\frac{q_0}{\theta} \right)^2 - \frac{q_0}{\theta} \frac{dq_0}{d\theta} \right) \frac{p_0}{(1-p_0)^2}. \quad (32)$$

б) *Вклад корпускулярной подсистемы в теплоемкость системы*, по (24) и (25), определяется формулами (в безразмерном виде)

$$\frac{C_{Vp}}{k_B N_p} = \sum_{i=1}^k \varepsilon_i \frac{dx_i}{d\theta}, \quad (34)$$

$$\frac{C_{Pp}}{k_B N_p} = \sum_{i=1}^k q_i \frac{dx_i}{d\theta}. \quad (35)$$

С учетом формул (21) и (23) производная

$$\frac{dx_i}{d\theta} = \frac{1}{1-p_0} \frac{dp_i}{d\theta} + \frac{p_i}{(1-p_0)^2} \frac{dp_0}{d\theta}, \quad (36)$$

где производные от вероятностей (21) определяются выражениями

$$\frac{dp_i}{d\theta} = \frac{p_i}{\theta^2} \left(q_i - \theta \frac{dq_i}{d\theta} \right). \quad (37)$$

Отметим, что второе слагаемое в формуле (36) определяет влияние вакансионной подсистемы на теплоемкость корпускулярной подсистемы.

Теплоемкости (34) и (35) при подстановке формул (36) и (37) зависят не только от температуры и теплоты на одну вакансию, но и от средних характеристик корпускулярной подсистемы

$$\frac{C_{Vp}}{k_B N_p} = \frac{\langle \varepsilon q \rangle - \theta \langle \varepsilon dq / d\theta \rangle}{\theta^2 (1 - p_0)} + \frac{\langle \varepsilon \rangle p_0 (q_0 - \theta dq_0 / d\theta)}{\theta^2 (1 - p_0)^2}, \quad (34)$$

$$\frac{C_{Pp}}{k_B N_p} = \frac{\langle q^2 \rangle - \theta \langle q dq / d\theta \rangle}{\theta^2 (1 - p_0)} + \frac{\langle q \rangle p_0 (q_0 - \theta dq_0 / d\theta)}{\theta^2 (1 - p_0)^2}, \quad (35)$$

здесь $\langle \varepsilon q \rangle = \sum_{i=1}^k \varepsilon_i q_i p_i$, $\langle \varepsilon \frac{dq}{d\theta} \rangle = \sum_{i=1}^k \varepsilon_i \frac{dq_i}{d\theta} p_i$, $\langle \varepsilon \rangle = \sum_{i=1}^k \varepsilon_i p_i$,

$$\langle q^2 \rangle = \sum_{i=1}^k q_i^2 p_i, \quad \langle q \frac{dq}{d\theta} \rangle = \sum_{i=1}^k q_i \frac{dq_i}{d\theta} p_i, \quad \langle q \rangle = \sum_{i=1}^k q_i p_i.$$

4. ЧИСЛЕННЫЕ РАСЧЕТЫ ТЕПЛОЕМКОСТЕЙ РАЗЛИЧНЫХ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СИСТЕМ

С целью изучения возможностей предложенной модели были проведены численные расчеты теплоемкостей с различными температурными зависимостями теплот хаотизации.

Пусть $q_0 = ak_B$, где a – постоянная величина. На рис. 1 показаны кривые температурной зависимости теплоемкости при постоянном давлении вакансионной подсистемы при разных значениях величины a . Из рис. 1 видно, что с уменьшением теплоты хаотизации вакансий q_0 теплоемкость C_{p0} стремится к универсальной газовой постоянной $R = 8,314 \text{ J/(mol} \cdot \text{K)}$ (см. кривые 1–4 на рис. 1), а число вакансий по (18) – к бесконечности. Рост значения параметра a приводит к практически нулевым величинам теплоемкости в области низких температур.

Аналогичное поведение демонстрирует и теплоемкость при постоянном давлении для корпускулярной подсистемы, если теплота хаотизации q_p остается неизменной. Численные расчеты показывают, что независимо от значений постоянных теплот хаотизации корпускулярной и вакансионной подсистем при выполнении соотношения $q_p/q_0 = 2$ теплоемкость системы (рис. 2, кривая 1; кривая 2 отображает изменения теплоемкости вакансионной подсистемы в зависимости от температуры системы) всегда стремится к $3R$, т.е. выполняется закон Дюлонга-Пти.

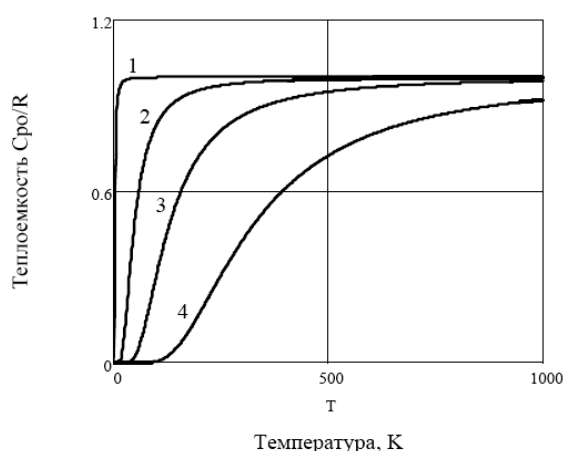


Рис. 1. Влияние параметра a на теплоемкость при постоянном давлении для вакансионной подсистемы: 1 – 10; 2 – 150; 3 – 400; 4 – 1000

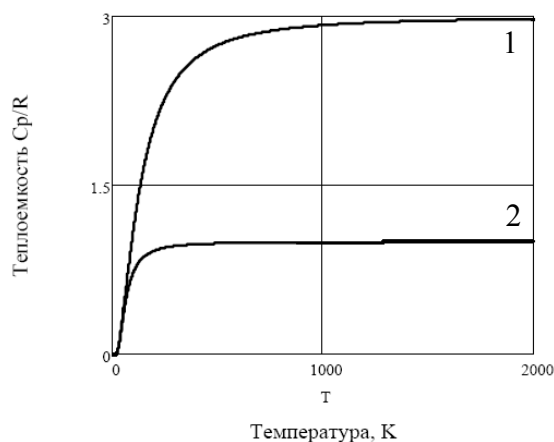


Рис. 2. Теплоемкость термодинамической системы при отношении теплот хаотизации равном 2:1 (пример: $q_0 = 200$, $q_p = 400$) для корпускулярной и вакансионной подсистем (1 – теплоемкость системы; 2 – теплоемкость вакансий)

На рис. 3 отображен ход изменения теплоемкости вакансионной подсистемы в зависимости от температуры, когда функция $q_0/k_B = a + bT^n$, при постоянных параметрах $b = 400$, $n = -1$ и варьировании константы a .

На рис. 4 показан график теплоемкости никеля при постоянном давлении* и наличии в нем магнитного фазового перехода второго рода при температуре Кюри $T_C = 631$ К. Численный расчет этой зависимости производился в предположении

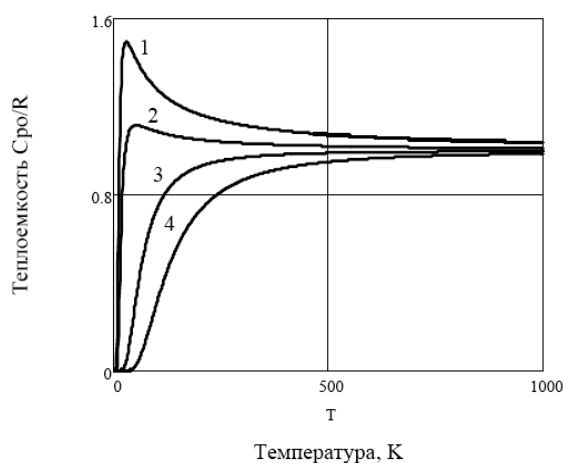


Рис. 3. Изменение теплоемкости при постоянном давлении для вакансионной подсистемы при варьировании параметра α : 1 – 10; 2 – 35; 3 – 200; 4 – 400

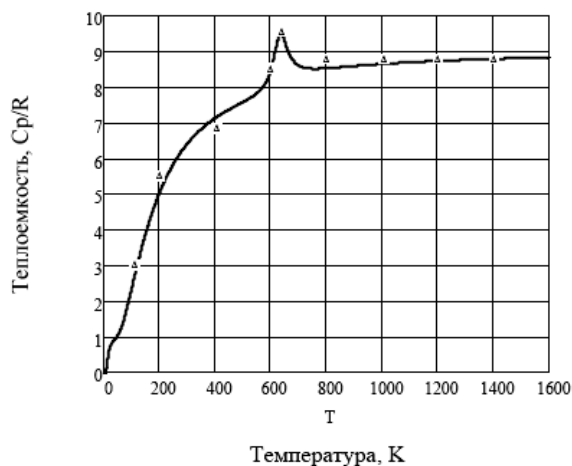


Рис. 4. Температурная зависимость теплоемкости при постоянном давлении для никеля (Δ – по Леппу [18, с.30])

встречных тепловых волн между корпускулярной и «вакансионной» подсистемами. Пик на кривой теплоемкости, согласно развитым представлениям, обусловлен температурной зависимостью теплоты хаотизации «вакансий», которая описывается

функцией $\frac{q_0(T)}{k_B} = \frac{T_c}{14.6} - \frac{0.7 \cdot T_p}{T_c} \arctg\left(\frac{T - T_c}{T_c - T_p}\right)$ (T_p – температура,

при которой намагниченность образца обращается в нуль при снижении температуры от точки фазового перехода). Для корпускулярной подсистемы теплота хаотизации задавалась фор-

мулой $\frac{q_p(T)}{k_B} = \frac{T_p}{1.8} + \frac{1.8 \cdot T_c}{T_p} \arctg\left(\frac{T - T_c}{T_c - T_p}\right)$. Таким образом, темпера-

турная зависимость теплоты хаотизации «частиц» оказывает существенное влияние на вид кривой температурной зависимости теплоемкости вакансий и корпускул.

В качестве второго примера рассмотрим модельный аморфный материал, который представляет собой сложную термодинамическую систему. В таких системах возможна синергетическая (совместная) реакция всех подсистем на изменения внеш-

* В качестве «вакансионной подсистемы» здесь выступает подсистема спинов, противоположно направленных по отношению к внутреннему молекулярному полю никеля.

него окружения. В частности, она проявляется в поведении корпускулярной (рис. 5, кривая 1) и вакансионной (рис. 5, кривая 2) подсистем при изменении теплового фона. На рис. 5 (кривая 3) показан ход температурной зависимости теплоемкости при постоянном давлении модельного аморфного материала при его нагревании (рис. 5 а) и охлаждении (рис. 5 б).

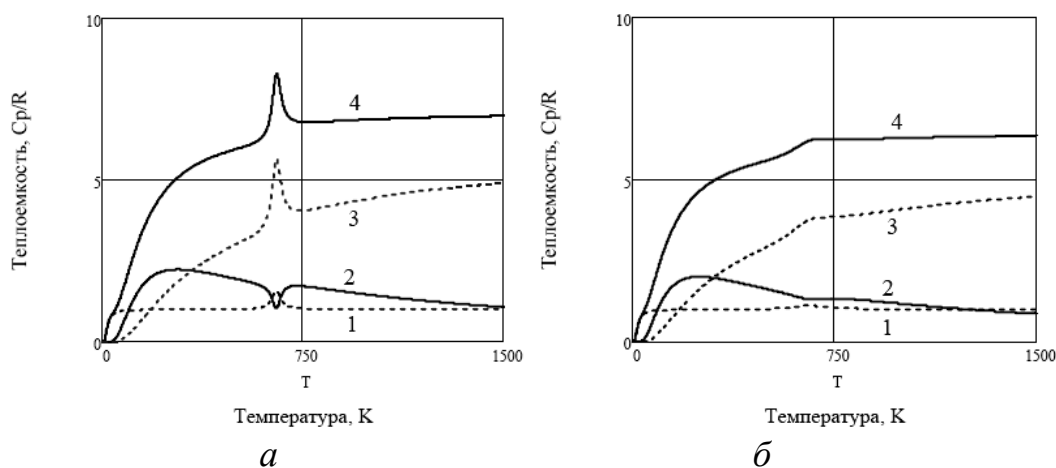


Рис. 5. Теплоемкость модельного стекла при его нагревании (а) и охлаждении переохлажденного расплава (б): 1 – часть теплоемкости, определяемая только вакансиями; 2 – часть теплоемкости, определяемая изменением концентрации частиц; 3 – часть теплоемкости, определяемая изменением относительной доли вакансий; 4 – теплоемкость стеклующегося материала

Поведение теплот хаотизации корпускулярной и вакансионной подсистем при возрастании температуры термодинамической системы имитировалось функциями:

$$\frac{q_0(T)}{k_B} = \frac{T_0}{12} - \frac{T_p}{T_0} \arctg\left(\frac{T - T_0}{T_0 - T_p}\right), \quad \frac{q_p(T)}{k_B} = \frac{T_p}{2} + \frac{4 \cdot T_0}{T_p} \arctg\left(\frac{T - T_0}{T_0 - T_p}\right),$$

где $T_0 = 650 \text{ K}$; $T_p = 630 \text{ K}$ – температуры «разогрева» вакансионной и корпускулярной подсистем при нагревании стекла (рис. 5 а). Ход температурных кривых теплот хаотизации «частиц» переохлажденного расплава при охлаждении (рис. 5 б) определялся теми же зависимостями при температуре «замерзания» корпускулярной подсистемы $T_p = 560 \text{ K}$.

Проведенные численные расчеты позволяют предложить следующий механизм формирования «замороженных» состо-

ний неравновесной термодинамической системы. Стекло содержит неравновесные вакансии (избыточный свободный объем, $\mu_0 \neq 0$), концентрация которых снижается при повышении температуры. Наряду со снижением концентрации вакансий приближение к температуре стеклообразного перехода сопровождается разрывом химических связей между корпускулами и другими необратимыми процессами. Этот этап предплавления материала приводит к снижению величины теплоемкости, так как доля тепла расходуется на частичную хаотизацию аморфной фазы. Переход стекла в состояние сильно переохлажденного расплава порождает новые степени свободы для вакансий и увеличивает их концентрацию, что приводит к резкому возрастанию теплоемкости как вакансионной подсистемы, так и термодинамической системы в целом.

Обратный процесс охлаждения стеклующегося расплава сопровождается ступенчатым переходом от жидкого состояния к твердому, так как вакансионная система не успевает подстраиваться к изменениям температуры при относительно больших скоростях отбора энергии из системы. Существование температурного интервала перехода определяется различием параметров корпускулярной и вакансионной подсистем, входящих в функциональную зависимость теплот хаотизации указанных подсистем от мгновенной температуры системы в выбранный момент времени.

5. ВЫВОДЫ

Экспериментальные исследования различных материалов продемонстрировали отклонения поведения кривых теплоемкости от классических закономерностей моделей Дебая и Эйнштейна. В этой связи рассмотрено влияние вакансионной подсистемы на теплоемкость многокомпонентной конденсированной среды с неизменным общим числом частиц. Полученные соотношения показали существенную зависимость вида кривых теплоемкости системы при постоянном давлении от тем-

пературных зависимостей введенных теплот хаотизации в корпускулярной и вакансионной подсистемах. Варьирование значений параметров температурной зависимости микроскопических теплот хаотизации для корпускулярной и вакансионной подсистем проявляется в виде экспериментально наблюдаемых отклонений теплоемкости от хода классических кривых.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Chen H.S., Turnbull D. Thermal Properties of Gold-Silicon Binary Alloy near the Eutectic Composition // *Journal of Applied Physics*, 1967. V. 38, № 9. P. 3646-3650.
2. Мазурин О.В. Стеклование и стабилизация неорганических стекол. Л.: «Наука», 1978. 62 с.
3. Тропин Т.В., Шмельцер Ю.П., Аксенов В.Л. Современные аспекты кинетической теории стеклования // *УФН*, 2016. Т. 186, № 1. С. 47-73.
4. Ринкевич А.Б., Перов Д.В., Самойлович М.И., Клещева С.М. Упругие свойства и теплоемкость опаловых матриц и 3D-нанокompозитных сред на их основе // *ФТТ*, 2010. Т.52, №12. С. 2405-2410.
5. Митаров Р.Г., Каллаев С.Н., Омаров З.М., Абдулвахидов К.Г. Теплоемкость мультиферроика // *ФТТ*, 2015. Т.57, № 4. С. 710-711.
6. Бодряков В.Ю. Корреляция коэффициента теплового расширения и теплоемкости криокристалла инертного газа: криптон // *ЖТФ*, 2015. Т. 85, № 3. С. 65-68.
7. Повзнер А.А., Филанович А.Н., Ноговицына Т.А. Термодинамическое моделирование упругих и тепловых свойств моносилицида кобальта // *ЖТФ*, 2016. Т. 86, № 6. С. 71-74.
8. Барабашко М.С. Низкотемпературная теплоемкость чистых и допированных простыми газами углеродных наноматериалов // Дис. на соиск. ... канд. ф.-м. наук. Харьков: ФТИНТ им. Б.И. Веркина. 161 с.

9. Ашкрофт Н., Мермин Н. Физика твердого тела. Т.2. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2002. 168 с.
10. Алиев Е.Н., Резник С.В., Юрченко С.О. О фрактонной модели тепловых свойств наноструктур // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. “Естественные науки”, 2008. № 4. С. 54-61.
11. Кузнецов В.М., Хромов В.И. Фрактальное представление теории Дебая для исследования теплоемкости макро- и наноструктур // ЖТФ, 2008. Т.78, вып. 11. С. 11-16.
12. Рехвиашвили С.Ш. Теплоемкость твердых тел фрактальной структуры с учетом ангармонизма колебаний атомов // ЖТФ, 2008. Т.78, вып. 12. С. 54-58.
13. Захаров А.Ю., Терехов С.В. Обобщенная решеточная модель фазовых равновесий в многокомпонентных системах // В кн.: Математические задачи химической термодинамики. Новосибирск: Наука, 1985. С.173-181.
14. Терехов С.В. Моделирование тепловых и кинетических свойств реальных систем. Донецк: Вебер (Донецкое отд.), 2007. 255 с.
15. Максимов Ю.Д. Математика. Выпуск 9. Теория вероятностей. Детализированный конспект. Справочник по одномерным непрерывным распределениям. СПб.: Изд-во СПбГПУ, 2002. 98 с.
16. Гиббс Дж. Термодинамика. Статистическая механика. М.: Наука, 1982. 584 с.
17. Ноздрев В.Ф. Курс термодинамики. М.: Просвещение, 1967. 247 с.
18. Зейтц Ф. Современная теория твердого тела. М.-Л.: Гос. изд-во тех.-теор. лит-ры, 1949. 736 с.

46. Физика и техника высоких давлений.

Донецк, 2017, т. 27, № 1, с. 103-116

PACS: 62.20.F–; 62.20.fg; 62.30.+d; 81.40.Jj

Терехов С.В., Варюхин В.Н., Мельник Т.Н., Юрченко В.М.

**ТЕРМОДИНАМИЧЕСКАЯ КОНЦЕПЦИЯ НЕРАВНОВЕСНОСТИ.
I. ФУНКЦИЯ НЕРАВНОВЕСНОСТИ. МОДЕЛИ КОМПЕНСАЦИИ**

Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина

Рукопись поступила в редакцию 15 ноября 2016 года

Предложен термодинамический подход к описанию неравновесного состояния синергетической системы, в которой протекают необратимые процессы. Проведена классификация систем и их состояний по отношению к взаимодействию с внешней средой. При сохранении локальной аддитивности неравновесной энтропии системы с помощью преобразования Лежандра введена функция неравновесности. Переход системы в термодинамическое равновесие сопровождается обращением в нуль функции неравновесности и ее дифференциала. Установлены способы компенсации неравновесности стохастическими процессами, в результате которых производится (утилизируется) энтропия.

Ключевые слова: термодинамическая система, неравновесность, самоорганизация, энтропия, необратимые процессы

1. ВВЕДЕНИЕ: САМООРГАНИЗАЦИЯ И НЕРАВНОВЕСНОСТЬ

Одной из актуальных проблем современной термодинамики является развитие представлений о неравновесных системах, в которых протекают необратимые процессы и которые обмениваются с окружающей средой не только частицами и энергией (*открытая система*), но и энтропией (*синергетическая система*). Такие объекты обладают рядом уникальных свойств: их поведение существенно изменяется при удалении от термо-

динамического равновесия; индивидуальные изменения состояний компонентов системы сменяются ее кооперативным ответом на внешнее воздействие; ряд параметров системы достигает критических значений, при которых возникают самоорганизующиеся структуры. Поэтому в данной работе объектом исследования является *синергетическая* система, для которой вклад энергии пограничных явлений в общую энергию системы существенно мал по сравнению с энергетикой объемных эффектов.

Цель работы состоит в выяснении возможности описания такой системы в рамках феноменологической термодинамики путем введения новой функции состояния, описывающей отклонение характеристической термодинамической функции от ее вида при равновесии. Такой подход позволяет рассматривать как слабонеравновесные, так и сильнонеравновесные объекты, расположенные вдали от точки термодинамического равновесия. Отметим, что достижение аргументами (и им сопряженными величинами) характеристической функции своих равновесных значений должно приводить к занулению вводимой функции для получения формул классической термодинамики. Самоорганизацией [1-3] называют процесс образования новой структуры системы, возникающей в результате кооперативного взаимодействия подсистем при пороговых значениях управляющих параметров в области нелинейного поведения или в неравновесных условиях. Этот процесс является квантом эволюционного преобразования системы в новое состояние [4]. Переструктурирование бывает диссипативным (ячейки Бенара, кольца Тейлора и др.), консервативным (образование структур кристаллов, биополимеров и т.д.) и дисперсионным (солитоны). Отличительной чертой самоорганизации является *универсальный* характер взаимосвязей между параметрами вне зависимости от природы системы [5].

Для объяснения сути процесса самоорганизации зачастую привлекают (см. [6, с. 492]) такие понятия, как открытость сис-

темы и необратимость процессов, отождествляя их с термином неравновесность. Отметим, что степень открытости системы определяется проницаемостью ее пограничного слоя для энергии и вещества, а переструктурирование – емкостными свойствами самой системы. Например, поглощение внешнего тепла может происходить за счет возбуждения внутренних степеней свободы атомов и молекул, увеличения скорости движения частиц, протекания эндотермических реакций, возникновения внутренних течений и т.д. Следовательно, отклонение состояния системы от положения термодинамического равновесия сопровождается протеканием процессов, которые стремятся вернуть систему в устойчивое положение: или к исходному положению термодинамического равновесия при малых отклонениях, или к новому стационарному состоянию при значительном отходе системы от положения равновесия. В последнем случае энтропия неравновесной системы должна определяться не только параметрами состояния, но и характеристиками протекающих процессов. Необратимый процесс является перестройкой локальных областей (*целл*) системы, при этом параметры системы эволюционируют от точки к точке. Необратимые процессы могут затухать за пределами целлы, или компенсировать друг друга так, что на макроуровне общий процесс будет обратимым, т. е. в этом случае энтропия системы не изменяется. Поэтому неравновесные состояния связаны с изменчивостью системы в целом по отношению к внешним воздействиям.

В этой связи выделяют метастабильное, нестабильное и стабильное состояния. Метастабильное и стабильное состояния являются устойчивыми, так как им соответствует постоянство или минимум характеристического термодинамического потенциала. При переходе системы в состояние, которое характеризуется максимумом термодинамического потенциала, она попадает в область неустойчивости. В этом случае внешняя подпитка системы веществом и энергией может перевести ее в состояние динамического равновесия с внешней средой (напр., ма-

ятник Капицы [7]). Таким образом, неравновесные состояния возникают как в открытых системах, так и при протекании необратимых процессов.

Вторым признаком неравновесного состояния является тип сопротивляемости системы изменениям внешней среды. Для большого числа объединений подсистем характерно появление положительной обратной связи [6]. Механизмами такого поведения системы являются спонтанные флуктуации характеристик ее состояния, стремление управляющих параметров к пороговым значениям и другие явления, перемещающие систему в точку бифуркации (ветвления). За точкой ветвления система с положительной обратной связью совершает сложные автоколебательные движения между состояниями со старой и новой структурами, подстраиваясь под состояние внешней среды путем самоорганизации.

Третья особенность неравновесности состоит в нарушении соотношений, установленных для равновесных систем, в частности, может разрушаться аддитивность экстенсивных величин (см., напр., энтропия Цаллиса [8]). Такое поведение системы связано с появлением более «длиннохвостых» степенных распределений частиц, которые порождают дополнительное слагаемое в энтропии системы в виде произведения энтропий подсистем.

В дальнейшем неравновесную систему, которая обменивается с внешней средой энергией, веществом и энтропией, будем называть *синергетической*. Структуры, которые возникают в синергетической системе при рассеивании энергии, называют *диссипативными* [9]. Для их существования требуется постоянный приток извне энергии и вещества (а в случае синергетической системы еще и внешней энтропии) при неизменном росте энтропии в ограниченном объекте или его компенсации процессами упорядочения. Следует отметить, что одному и тому же набору граничных условий может соответствовать множество

различных диссипативных структур. Выбор той или иной организации системы зависит от доминирующего в данный момент времени реального процесса. Доминантность процесса определяется внешними условиями, возникающими флуктуациями характеристик синергетической системы, значениями управляющих параметров и временем затухания процесса.

Самоорганизация и рождение новых структур являются следствием потери устойчивости синергетической системой при ее смещении из положения равновесия. Отметим, что синергетическая система находится вблизи положения термодинамического равновесия, если производные по времени и пространству от термодинамических величин значительно меньше, чем отношение этой величины к характерному времени процесса или характерному размеру целлы, соответственно. В противном случае синергетическая система находится вдали от равновесия. Ее характеристические функции будут зависеть не только от пространственно-временных и термодинамических аргументов, но и от скоростей изменения последних координат.

Из возникающего спектра структурных единиц отбирается та, которая наиболее устойчива по отношению к происходящим изменениям во внешней среде. Завершение процесса переструктурирования отвечает переходу синергетической системы в новое устойчивое состояние (термодинамическое равновесие или стационарное состояние).

Так как явление переструктурирования наблюдается в различных системах, поэтому возникает необходимость развития термодинамической концепции понятия неравновесности; определения влияния скоростей изменения сопряженных к термодинамическим координатам синергетической системы на ее характеристические функции; вывода и решения уравнений для этих величин.

2. ПРОИЗВОДСТВО АДДИТИВНОЙ ЭНТРОПИИ

Рассмотрим систему в термодинамическом пространстве безразмерных (параметры системы отнесены к некоторым характерным величинам) обобщенных координат: $q_1 = U$ – внутренняя энергия, $q_2 = N$ – число частиц, $q_3 = V$ – объем системы. Равновесное состояние системы поддерживается безразмерными потенциалами термодинамических полей: $\varphi_1 = 1/T$ – теплового (T – абсолютная температура), $\varphi_2 = \mu/T$ – химического (μ – химический потенциал частиц), $\varphi_3 = P/T$ – механического (P – давление). Тогда энтропия системы определяется формулой [10]

$$S = \sum_{i=1}^3 \varphi_i q_i, \quad (1)$$

а ее дифференциал –

$$dS = \sum_{i=1}^3 \varphi_i dq_i, \quad (2)$$

при выполнении равенства, которое обеспечивает экстенсивный (аддитивный) характер энтропии:

$$\sum_{i=1}^3 q_i d\varphi_i = 0. \quad (3)$$

Равенство (3) эквивалентно уравнению Дюгема-Гиббса [11], оно показывает, что равновесие достигается: а) при постоянстве потенциалов термодинамических полей ($\varphi_i = const$); б) при компенсации бесконечно малого изменения одного из потенциалов термодинамических полей изменениями двух других потенциалов. Таким образом, отклонение термодинамической системы от положения равновесия характеризуется изменением ее состояния, которое связано с бесконечно малыми изменениями потенциалов термодинамических полей.

Локальная аддитивность энтропии (2) позволяет классифицировать термодинамические системы по степени их открытости: изолированная, закрытая, открытая и синергетическая (табл. 1).

Таблица 1.

Типы термодинамических систем по степени их открытости

№ п/п	Тип системы	Внутренняя энергия, q_1	Число частиц, q_2	Объем системы, q_3	Изменение энтропии, dS
1	Изолированная	const	const	const	0
2	Закрытая	<i>change</i>	const	const	$\varphi_1 dq_1$
3	Открытая	<i>change</i>	<i>change</i>	const	$\varphi_1 dq_1 + \varphi_2 dq_2$
4	Синергетическая	<i>change</i>	<i>change</i>	<i>change</i>	$\varphi_1 dq_1 + \varphi_2 dq_2 + \varphi_3 dq_3$

На микроуровне первые три системы формируются ансамблями частиц, подчиняющимися микроканоническому, каноническому и макроканоническому распределениям [12]. Следовательно, в синергетической системе возникают такие ансамбли частиц, которые формируют стационарные состояния в результате: перепутывания фазовых траекторий частиц, возникновения новых инвариантных и резонансных торов движения, замены эргодичности на перемешиваемость и т.д. На макроуровне неравновесность системы проявляется в виде разрушения аддитивности экстенсивных параметров; отклонения соотношений, установленных в рамках равновесной термодинамики, от их классических формулировок; перераспределения вещества; эволюции потенциалов термодинамических полей как в термодинамическом, так и в реальном пространственно-временном континууме.

Для изолированной системы дифференциал энтропии всегда равен нулю ($dS=0$ – обратимые процессы), поэтому изменения в такой системе имеют обратимый характер. В системах 2)–4) (табл. 1) эта величина может принимать или нулевое значение, или быть положительной ($dS > 0$ – необратимые процессы). Следовательно, для величины (2) выполняется нестрогое неравенство:

$$dS = \sum_{i=1}^3 \varphi_i dq_i \geq 0. \quad (4)$$

Производство энтропии наблюдается при протекании химической реакции (скалярный процесс: задается произведением химического сродства на скорость реакции), необратимого процесса (векторный процесс: задается произведением потока той или иной величины на термодинамическую силу, порождающую поток) и течения вещества (тензорный процесс: задается произведением тензора напряжений на тензор изменений в системе). Вне зависимости от характера (скалярный, векторный или тензорный) и типа (обратимый или необратимый) процесса изменения в системе можно описать приращением энтропии и скоростью ее изменения.

Например, производство аддитивной энтропии при пространственно-временном (t – время, r – средний радиус-вектор центра масс локальной области) изменении экстенсивных характеристик определяется субстанциональной (среда считается сплошной, клетка движется без ускорения) скоростью изменения энтропии:

$$\frac{dS}{dt} = \sum_{i=1}^3 \varphi_i \frac{dq_i}{dt} = \sum_{i=1}^3 \varphi_i \left(\frac{\partial q_i}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{J}_i \right) - \sum_{i=1}^3 q_i \operatorname{div}(\varphi_i \mathbf{v}) + \sum_{i=1}^3 \mathbf{J}_i \mathbf{X}_i, \quad (5)$$

где $\mathbf{J}_i = q_i \mathbf{v}$ – конвективный поток i -ой экстенсивной величины, $\mathbf{v} = d\mathbf{r}/dt$ – скорость перемещения центра масс клетки, $\mathbf{X}_i = \nabla \varphi_i$ – термодинамическая сила, порождаемая градиентом i -ого потенциала интенсивных характеристик. Из соотношения (5) видно, что формула Дэфея-Пригожина [13] для производства энтропии синергетической системы с ненарушенной аддитивностью экстенсивных величин

$$\frac{dS}{dt} = \sum_{i=1}^3 \mathbf{J}_i \mathbf{X}_i \geq 0 \quad (6)$$

имеет место в трех случаях:

1) для несжимаемых сред ($\operatorname{div} \mathbf{v} = 0$) экстенсивные характеристики q_i локально сохраняются ($dq_i/dt = 0 \Rightarrow q_i = C_i$)

$$\frac{\partial q_i}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{J}_i = 0, \quad (7)$$

а расходимость потоков потенциалов термодинамических полей равна нулю

$$\operatorname{div}(\varphi_i \mathbf{v}) = 0. \quad (8)$$

Следовательно, протекание необратимых процессов в локальных областях не приводит к росту энтропии. Другими словами, транспортные процессы в целле не вызывают изменений вокруг нее, т.е. на макроуровне наблюдается обратимый термодинамический процесс. Отметим, что уравнение (7) справедливо и для сжимаемых сред ($\operatorname{div} \mathbf{v} \neq 0$), если скорость изменения i -ой экстенсивной характеристики компенсируется расходимостью поля скоростей, т.е. при выполнении равенства

$$dq_i/dt = -q_i \operatorname{div} \mathbf{v};$$

2) для каждого i -ого экстенсивного аргумента справедливо уравнение

$$\varphi_i \left(\frac{\partial q_i}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{J}_i \right) - q_i \operatorname{div}(\varphi_i \mathbf{v}) = 0; \quad (9)$$

3) выполняется равенство

$$\sum_{i=1}^3 \left[\varphi_i \left(\frac{\partial q_i}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{J}_i \right) - q_i \operatorname{div}(\varphi_i \mathbf{v}) \right] = 0, \quad (10)$$

которое с учетом определения (4) совпадает с формулой (6).

Таким образом, транспортные процессы не являются существенным признаком неравновесного состояния термодинамической системы. Кроме того, изучение необратимых процессов в реальном пространстве-времени (R -пространстве) не позволяет исследовать кинетическую перестройку потенциалов термодинамических полей, динамические эффекты неравновесности, возникновение волн, образование иерархических структур и т.д. Поэтому развитие существующей модели в направлении учета обобщенных термодинамических координат q_i и скоростей их изменения \dot{q}_i (термодинамическое фазовое пространство или Q -пространство) представляет собой одну из актуальных проблем неравновесной термодинамики и теории самоор-

ганизации. В этой связи исследуем отклонение термодинамического определения энтропии от ее классической формулировки.

3. ФУНКЦИЯ НЕРАВНОВЕСНОСТИ

Дополним R -пространство осями обобщенных термодинамических координат q_i и скоростей их изменения \dot{q}_i . Такой пространственный континуум будем называть расширенным или P -пространством. Дифференциал в P -пространстве обозначим буквой D для его отличия от дифференциала в R -пространстве

$$d_r = dt \frac{\partial}{\partial t} + dr \frac{\partial}{\partial r} + dv \frac{\partial}{\partial v} \quad (11)$$

и от дифференциала в Q -пространстве

$$d_q = \sum_{i=1}^3 \left(dq_i \frac{\partial}{\partial q_i} + d\dot{q}_i \frac{\partial}{\partial \dot{q}_i} \right) \quad (12)$$

(для других аргументов: $d_q = \sum_{i=1}^3 \left(d\varphi_i \frac{\partial}{\partial \varphi_i} + d\dot{q}_i \frac{\partial}{\partial \dot{q}_i} \right)$). Дифференциал

D представляет собой сумму приведенных выражений (11) и (12). Его применение позволяет отслеживать изменения состояния неравновесной системы в обеих областях расширенного пространства.

Локальные законы изменения характеристических функций отображаются дифференциальными уравнениями, которые представляют собой действие некоторого оператора на искомую функцию. При перемещении центра масс целлы без ускорения или независимости исследуемой функции явным образом от скорости движения центра масс локальной области транспортные уравнения в R -пространстве задаются субстанциональным оператором вида

$$\frac{d_r}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}. \quad (13)$$

Если действие оператора (13) на функцию равно нулю, то гово-

рят о локальном сохранении физической величины, которая описывается данной функцией (см. уравнение (7)). Использование субстанционального оператора

$$\frac{d_r}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{a} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \quad (14)$$

(\mathbf{a} – ускорение центра масс локальной области) обусловлено зависимостью искомой функции от скорости движения центра масс целлы. Операторы, аналогичные (14), применялись при построении кинетических моделей Больцманом [14] и Власовым [15].

В дальнейшем для исследования процессов и явлений в P -пространстве будем использовать эволюционный оператор

$$\frac{D}{dt} = \frac{d_r}{dt} + \frac{d_q}{dt}, \quad (15)$$

когда субстанциональный оператор в R -пространстве задается формулой (13). Например, для обобщенной координаты q_k выполнение равенства

$$\frac{Dq_k}{dt} = \frac{d_r q_k}{dt} + \frac{d_q q_k}{dt} = q'_k + \dot{q}_k \quad (16)$$

указывает на то, что скорость изменения обобщенной координаты в P -пространстве состоит из суммы скоростей ее изменения в R - и Q -пространствах. Первое слагаемое в формуле (16) описывает эволюцию обобщенной координаты q_k за счет локальной скорости изменения координаты и перемещения центра масс целлы, а второе – за счет внутренних процессов.

Обращение выражения (16) в нуль указывает на сохранение обобщенной координаты в расширенном пространстве, при этом уравнение (7) принимает вид неоднородного уравнения

$$\frac{\partial q_k}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{J}_k = \sigma_k, \quad (17)$$

где величина $\sigma_k = q_k \operatorname{div} \mathbf{v} - \dot{q}_k$ связана с производством (утилизацией) обобщенной координаты q_k . Таким образом, расширенное реальное пространство позволяет описать не только явле-

ние локального сохранения экстенсивной величины, но и ее производство (утилизацию).

На примере энтропии для системы, в которой протекают векторные процессы, рассмотрим построение модели, основанной на исследовании отклонения формулы для термодинамической функции от ее классического вида. Соотношения (4)–(10) справедливы в том случае, когда сохраняется локальная экстенсивность (аддитивность) энтропии, зависящей только от обобщенных термодинамических координат q_i . При общем подходе неравновесная энтропия $S(t, \mathbf{r}, q_i, \dot{q}_i)$ является функцией пространственно-временных переменных, а в Q -пространстве – обобщенных термодинамических координат q_i и их скоростей изменения \dot{q}_i . Пусть в неравновесном состоянии энтропия сохраняет свойство аддитивности при бесконечно малых изменениях обобщенных координат. Используя преобразование Лежандра [16, 17] по отношению к энтропии S неравновесной системы, введем в рассмотрение функцию неравновесности:

$$W(t, \mathbf{r}, \varphi_i, \dot{q}_i) = S(t, \mathbf{r}, q_i, \dot{q}_i) - \sum_{i=1}^3 \left(\frac{\partial S}{\partial q_i} \right)_{q_j \neq i} q_i = S(t, \mathbf{r}, q_i, \dot{q}_i) - \sum_{i=1}^3 \varphi_i q_i. \quad (18)$$

Для системы в равновесном состоянии выражение (18) обращается в нуль ($W(t, \mathbf{r}, \varphi_i, \dot{q}_i) = 0$) и формула для энтропии системы принимает классический вид (1). Отметим следующие факты: неравновесная энтропия не описывается формулой (1); свойство аддитивности соблюдается в дифференциальной форме (2), т.е. с учетом формулы (16) дифференциал энтропии в P -пространстве равен

$$DS = \sum_{i=1}^3 \varphi_i Dq_i = \sum_{i=1}^3 \varphi_i (q'_i + \dot{q}_i) dt; \quad (19)$$

пространство потенциалов φ_i термодинамических полей является сопряженным (касательным) пространством к термодинамическому пространству экстенсивных величин q_i . Дифференциал функции неравновесности (с учетом (19) для дифференциала неравновесной энтропии) равен

$$DW = -\sum_{i=1}^3 q_i D\varphi_i = -\sum_{i=1}^3 q_i (\varphi'_i + \dot{\varphi}_i) dt. \quad (20)$$

Функцию неравновесности $W(t, \mathbf{r}, \varphi_i, \dot{q}_i)$ можно использовать для термодинамического описания неравновесной системы в терминах потенциалов термодинамических полей. Формула (20) позволяет классифицировать неравновесные состояния системы в зависимости от изменений потенциалов термодинамических полей (табл. 2).

Таблица 2.

Типы состояний термодинамической системы по степени ее неравновесности

№ п/п	Тип состояния	Тепловое поле, φ_1	Химическое поле, φ_2	Механическое поле, φ_3	Изменение функции неравновесности, dW
1	Равновесное	const	const	const	0
2	Теплообменное	<i>change</i>	const	const	$q_1 d\varphi_1$
3	Термохимическое	<i>change</i>	<i>change</i>	const	$q_1 d\varphi_1 + q_2 d\varphi_2$
4	Неравновесное	<i>change</i>	<i>change</i>	<i>change</i>	$q_1 d\varphi_1 + q_2 d\varphi_2 + q_3 d\varphi_3$

Из табл. 2 видно, что нарушение равновесности системы происходит в результате изменений потенциалов термодинамических полей в P -пространстве. В общепринятых обозначениях соотношение (20) имеет вид:

$$TDW = (S - W)DT + ND\mu - VDP. \quad (21)$$

В силу того, что в равновесии функция $W=0$ и справедливо соотношение Дюгема-Гиббса, дифференциал функции неравновесности в расширенном P -пространстве также обращается в нуль. Таким образом, термодинамическое равновесие достигается

при выполнении равенств $\begin{cases} W = 0 \\ DW = 0 \end{cases}$. Из соотношения (21)

следует, что при приближении к равновесию величина $TW \rightarrow const$, т.е. функция W в окрестности равновесия ведет себя как линейная функция потенциала теплового поля (теплообменное неравновесие).

4. МОДЕЛИ КОМПЕНСАЦИИ НЕРАВНОВЕСНОСТИ

Смещение системы из положения равновесия приводит к возникновению необратимых процессов, которые изменяют производство (утилизацию) энтропии (функции неравновесности) в P -пространстве. С учетом формул (15) и (19) дифференциал энтропии неравновесной системы в расширенном пространстве определяется формулой

$$DS(t, \mathbf{r}, q_i, \dot{q}_i) = d_r S + d_q S = \left(dt \frac{\partial S}{\partial t} + d\mathbf{r} \nabla S \right) + \sum_{i=1}^3 \left[dq_i \frac{\partial S}{\partial q_i} + d\dot{q}_i \frac{\partial S}{\partial \dot{q}_i} \right], \quad (22)$$

где $\left(\frac{\partial S}{\partial q_i} \right)_{q_j \neq i} = \varphi_i$ определяет i -тый неравновесный потенциал $\varphi_i(t, \mathbf{r}, q_i, \dot{q}_i)$. Используя формулы (5) и (19), получим соотношение

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla S + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial S}{\partial \dot{q}_i} \ddot{q}_i = \sum_{i=1}^3 \varphi_i q_i', \quad (23)$$

или

$$\frac{d_r S}{dt} = \sum_{i=1}^3 \left(\varphi_i q_i' - \frac{\partial S}{\partial \dot{q}_i} \ddot{q}_i \right). \quad (24)$$

Сравнение (6) и (24) показывает, что выполняется равенство

$$\sum_{i=1}^3 \left(\varphi_i q_i' - \frac{\partial S}{\partial \dot{q}_i} \ddot{q}_i \right) = \sum_{i=1}^3 \mathbf{J}_i \mathbf{X}_i, \quad (25)$$

т.е. в случае локального сохранения экстенсивных характеристик в R -пространстве ($q_i' = 0$) последнее слагаемое в формуле (22) определяется производством энтропии.

Применение элементарных преобразований к первой сумме в правой части (24) позволяет привести равенство (24) к виду

$$\frac{d_r S}{dt} = - \frac{d_r W}{dt} - \sum_{i=1}^3 \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial t} q_i + \frac{\partial S}{\partial \dot{q}_i} \ddot{q}_i \right), \quad (26)$$

который отображает связь между производствами энтропии и функции неравновесности в R -пространстве. Аналогичное рас-

смотрение в расширенном пространстве дифференциала функции неравновесности (20) приводит к выражению

$$\frac{d_r W}{dt} = -\frac{d_r S}{dt} - \sum_{i=1}^3 \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial t} q_i + \frac{\partial W}{\partial \dot{q}_i} \ddot{q}_i \right). \quad (27)$$

Следствием из формул (26) и (27) является выполнение равенства

$$\sum_{i=1}^3 \left(\frac{\partial S}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial W}{\partial \dot{q}_i} \right) \ddot{q}_i = 0 \text{ (или в частном случае } \frac{\partial W}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial S}{\partial \dot{q}_i} = \zeta_i), \quad (28)$$

которое указывает на тождественность реакции ζ_i системы на изменения энтропии и функции неравновесности.

Подстановка формулы (26) в первое равенство (22) приводит к соотношению

$$\frac{DS}{dt} = -\frac{DW}{dt} + \frac{d_q S}{dt} - \sum_{i=1}^3 \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial t} + \frac{d_q \varphi_i}{dt} \right) q_i, \quad (29)$$

где (по формуле (22)) величина

$$\frac{d_q S}{dt} = \sum_{i=1}^3 \left[\varphi_i \dot{q}_i + \frac{\partial S}{\partial \dot{q}_i} \ddot{q}_i \right]. \quad (30)$$

Из формул (22) и (29) следует связь между производством функции неравновесности в P -пространстве и производством энтропии в R -пространстве

$$-\frac{DW}{dt} = \frac{d_r S}{dt} + \sum_{i=1}^3 \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial t} + \frac{d_q \varphi_i}{dt} \right) q_i. \quad (31)$$

Подстановка формулы (26) в (31) с учетом вида оператора (12) для функции неравновесности (выражение в скобках формулы (12)) приводит к тому, что

$$\frac{d_q W}{dt} = \sum_{i=1}^3 \left(-\varphi_i q_i + \frac{\partial S}{\partial \dot{q}_i} \ddot{q}_i \right), \quad (32)$$

которое в иной форме записи сводится к формуле (28). Формулы (29) и (31) определяют модель компенсации изменений в P -пространстве энтропии и функции неравновесности производством энтропии и неравновесности в двух его подпространствах. Пусть для всех потенциалов выполняется уравнение

$$\xi_i = \frac{\partial \varphi_i}{\partial t} + \frac{d_q \varphi_i}{dt} = \frac{\partial \varphi_i}{\partial t} + \dot{\varphi}_i = 0, \quad (33)$$

откуда следует очевидный вывод: стационарность потенциалов термодинамических полей ($\partial \varphi_i / \partial t = 0$) является причиной того, что они постоянны ($\dot{\varphi}_i = 0$) в Q -области расширенного пространства. На макроуровне это условие определяет переход системы в стационарное состояние. Выполнение соотношения (33) позволяет описать необратимые процессы в неравновесной системе моделью перекрестной компенсации асимметричного вида. Она базируется на принципе: производство энтропии в реальном пространстве-времени тормозится процессами упорядочения и переструктурирования в расширенном пространстве, которые проявляются в снижении роста функции неравновесности. В этом случае выполняются равенства

$$-\frac{DW}{dt} = \frac{d_r S}{dt}; \quad \frac{DS}{dt} = -\frac{DW}{dt} + \frac{d_q S}{dt}. \quad (34)$$

Из первой формулы (34) видно, что неравновесность определяется производством энтропии, а не протеканием необратимых процессов или степенью открытости системы. Отсутствие производства энтропии при протекании необратимых процессов возможно, например, когда перпендикулярны поток и термодинамическая сила одного типа.

Формулы (34) показывают, что модель перекрестной компенсации симметричного типа реализуется при дополнительном условии, когда производства энтропии и неравновесности совпадают в термодинамической фазовой области расширенного пространства, т.е.

$$\frac{d_q W}{dt} = \frac{d_q S}{dt}. \quad (35)$$

Формула (35) отображает постоянство разности между энтропией и функцией неравновесности в термодинамическом фазовом пространстве (Q -пространстве). В этом случае перераспределение энергии, вещества и потенциалов термодинамических

полей в реальном R -пространстве тормозит производство энтропии и убыль неравновесности в P -пространстве.

В заключение отметим, что модель полной компенсации определяется формулами

$$\frac{DS}{dt} = -\frac{DW}{dt}; \quad \frac{d_q S}{dt} = \sum_{i=1}^3 \xi_i q_i,$$

которые указывают на сохранение величины $W+S$ (инварианта движения) в P -пространстве (первая формула).

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Анализ понятий «открытость системы» и «необратимые процессы» показывает их нетождественность понятию «неравновесность». Развитие неравновесности вынуждает термодинамическую систему переструктурироваться и перейти в новое устойчивое состояние (самоорганизация). В этой связи проведены классификации типов систем и их состояний (табл. 1 и 2), возникающих при взаимодействии с внешней средой. Термодинамический подход к описанию неравновесности позволяет ввести новую функцию состояния, полученную из энтропии неравновесной системы с помощью преобразования Лежандра. Эта функция и ее дифференциал обращаются в нуль при переходе в состояние термодинамического равновесия, а энтропия системы описывается классическим выражением. Рассмотрены варианты компенсации возникающей неравновесности системы хаотическими процессами, т.е. производством энтропии. Отметим, что установленные формулы (26)–(35) определяют кинетические аспекты изменений потенциалов термодинамических полей в расширенном пространстве с возможностью возникновения динамических эффектов. Они также показывают, что в терминах потенциалов можно проводить изучение неравновесных состояний термодинамической системы и находить зависимости термодинамических величин от скоростей изменения термодинамических аргументов. Таким образом,

анализ термодинамической концепции неравновесности показывает перспективность рассмотрения этого понятия в плане отклонения термодинамических функций состояния от их классических выражений в неравновесных условиях.

1. Дж. Николис, И. Пригожин, Самоорганизация в неравновесных системах, Мир, Москва (1979).
 2. А.И. Олемской, Д.О. Харченко, Самоорганизация самоподобных стохастических систем, Регулярная и хаотическая динамика, Институт компьютерных исследований, Ижевск (2007).
 3. Д.О. Харченко, В.О. Харченко, А.В. Дворниченко, Процессы упорядочения сложных систем, Наукова думка, Киев (2011).
 4. В. Эбелинг, А. Энгель, Р. Файстель, Физика процессов эволюции, Едиториал УРСС, Москва (2001).
 5. С.В. Терехов, ФТВД **22**, 33, (2012).
 6. М.К. Гусейханов, О.Р. Раджабов, Концепции современного естествознания, Издательско-торговая корпорация «Дашков и К°», Москва (2007).
 7. П.Л. Капица, ЖЭТФ **21**, 588 (1951).
 8. С. Tsallis, Entropy **13** (10), 1765 (2011).
 9. И. Пригожин, Д. Конденуди, Современная термодинамика. От тепловых двигателей до диссипативных структур, Мир, Москва (2002).
 10. М.В. Коробов, http://www.chemport.ru/data/chemipedia/article_4549.html.
 11. С.В. Терехов, Моделирование тепловых и кинетических свойств реальных систем, «Вебер» (Донецкое отд.), Донецк (2007).
 12. И.А. Квасников, Термодинамика и статистическая физика. Т.2: Теория равновесных систем. Статистическая физика, Едиториал УРСС, Москва (2002).
 13. Л.М. Мартюшев, В.Д. Селезнев, Принцип максимальности производства энтропии в физике и смежных областях, ГУО В ПО УГТУ-УПИ, Екатеринбург (2006).
-

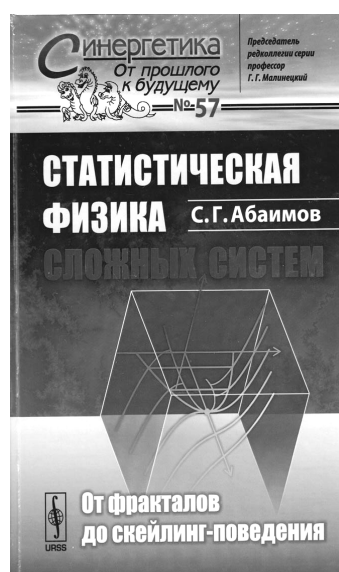
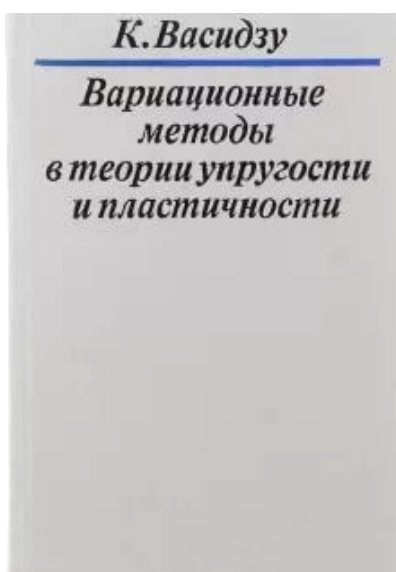
14. К. Черчиньяни, Теория и приложения уравнения Больцмана, Мир, М.: Москва (1978).
15. А.А. Власов, Нелокальная статистическая механика, Наука, Москва (1978).
16. http://dic.academic.ru/dic.nsf/enc_mathematics/2690/ЛЕЖАНДРА.
17. В.И. Арнольд, Математические методы классической механики, Наука, Москва (1989).

Terekhov S.V., Varyukhin V.N., Melnik T.N., Yurchenko V.M.

THERMODYNAMIC CONCEPT OF NON-EQUILIBRIUM. I. FUNCTION OF NON-EQUILIBRIUM. COMPENSATION MODELS

A thermodynamic approach to description of a non-equilibrium state of a synergetic system where irreversible processes take place is proposed. The systems and the states are classified with respect to the interaction with the environment. In the case when local additivity of the non-equilibrium entropy of the system is conserved, a function of non-equilibrium is introduced by Legendre transformation. Transition of the system to thermodynamic equilibrium is accompanied by vanishing function of non-equilibrium and its differential. The methods of non-equilibrium compensation by stochastic processes associated with entropy production (utilization) are found.

Keywords: thermodynamics system, non-equilibrium, self-organization, entropy, irreversible processes



47. Физика и техника высоких давлений.

Донецк, 2017, т. 27, № 2, с. 83-97

PACS: 62.20.F–; 62.20.fg; 62.30.+d; 81.40.Jj

Терехов С.В.¹, **Варюхин В.Н.**¹, **Мельник Т.Н.**¹, **Петренко А.Г.**²,
Юрченко В.М.¹

**ТЕРМОДИНАМИЧЕСКАЯ КОНЦЕПЦИЯ НЕРАВНОВЕСНОСТИ.
II. СОСТОЯНИЯ НЕРАВНОВЕСНОЙ СИСТЕМЫ
И ИХ ЭВОЛЮЦИЯ**

¹Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина
²Донецкий национальный университет

Статья поступила в редакцию 4 марта 2017 года

В рамках модели компенсации неравновесности проведена классификация состояний синергетической системы. Установлено существование нового инварианта движения, представляющего собой сумму функции неравновесности и энтропии системы. Продемонстрирована взаимосвязь кинетических и динамических процессов, порождающая периодические изменения значений интенсивных и экстенсивных величин в синергетической системе. Получены уравнения эволюции потенциалов термодинамических полей и найдены явные зависимости этих потенциалов от сопряженной экстенсивной характеристики и скорости ее изменения.

Ключевые слова: термодинамическая система, неравновесность, самоорганизация, энтропия, необратимые процессы

1. ВВЕДЕНИЕ: КЛАССИФИКАЦИЯ НЕРАВНОВЕСНЫХ СОСТОЯНИЙ

Значительные отклонения открытой системы от положения термодинамического равновесия сопровождается возникновением периодических структур, колебаний экстенсивных величин и волн термодинамических полей [1-8]. Коллективная ре-

акция синергетической системы на изменения внешних условий приводит к перестройке ее внутренней структуры и полей, обеспечивающих ее устойчивое состояние. В этой связи целью данной работы является классификация неравновесных состояний синергетической системы, а также определение условий перехода от необратимых процессов к возникновению в системе колебательных и волновых движений.

В работе [9] предложен термодинамический подход к описанию синергетической системы, состояние которой формируется необратимыми процессами. Вид процесса, протекающего в неравновесной системе, определяется в P -пространстве (см. обозначения в [9]) обращением в нуль дифференциала энтропии DS ($DS = d_r S + d_q S = 0$ – обратимый процесс, напомним, что для неравновесной синергетической системы энтропия является функцией $S(t, \mathbf{r}, q_i, \dot{q}_i)$ от времени, пространственных координат, обобщенных термодинамических величин и скоростей их изменения) или его нетривиальностью ($DS > 0$ (хаотизация) или $DS < 0$ (упорядочение) – необратимый процесс). При этом необходимым, но недостаточным условием (дополнительно требуется выполнение равенства нулю функции неравновесности ($W = 0$, согласно [9], $W(t, \mathbf{r}, \varphi_i, \dot{q}_i) = S(t, \mathbf{r}, q_i, \dot{q}_i) - \sum_{i=1}^3 \varphi_i q_i$), которое определяет равновесие, а $W \neq 0$ – его отсутствие) нахождения системы в состоянии равновесия является обращение в нуль дифференциала функции неравновесности DW ($DW = D_r W + D_q W = 0$) в P -пространстве (состоит из обычного пространства-времени R и пространства термодинамических обобщенных координат Q). В частности, классификация состояний неравновесной системы в модели перекрестной компенсации асимметричного типа (формулы (29), (31) и (33) из работы [9]) приведена в таблице.

Как видно из таблицы, в P -пространстве можно выделить 4 группы состояний по условию равновесности состояния систе-

Таблица.

Состояния синергетической системы и условия обратимости
неравновесных процессов

№ п/п	R-пространство		Q-пространство		P-пространство		Условие обратимости процесса в P-пространстве
	$d_r S$	$d_r W$	$d_q S$	$d_q W$	DS	DW	
I	0 0	0 ∅	0 0	0 ∅	0	0	$d_r S = 0$ и $d_q S = 0$
II	0 0	0 ∅	∅ ∅	0 ∅	$d_q S$	0	$d_q S = 0$
III	∅ ∅	∅ 0 ∅	0 0 0	0 ∅ ∅	$d_r S$	$-d_r S$	$d_r S = 0$
IV	∅ ∅ ∅	∅ 0 ∅	∅ ∅ ∅	0 ∅ ∅	$d_r S +$ $d_q S$	$-d_r S$	$d_r S + d_q S = 0$

Примечание: ∅ означает, что величина отлична от нуля

мы и типу производства энтропии. Группы I и II являются равновесноподобными, а группы III и IV – неравновесными. В группе I первая строка определяет сохранение энтропии и функции неравновесности в обеих частях P-пространства. Вторая строка группы I задает сохранение тех же величин, если выполняется равенство (32) из [9]. Группа II формируется состояниями, которые обеспечивают сохранение энтропии в R-пространстве при ее изменении в Q-пространстве, которое не влияет на равновесноподобное состояние системы (состояние, которое описывается второй строкой группы II, отвечает выполнению условия (32) из [9]). Группа III отвечает состояниям, которые формируются при производстве энтропии в R-пространстве и его отсутствии в Q-пространстве. При этом производство неравновесности может происходить в одной из частей расширенного пространства (первая строка – в R-пространстве; вторая строка – в Q-пространстве) или одновременно в обеих областях P-пространства (третья строка группы III). Группа IV определяет производством энтропии в обеих областях P-пространства с описанными выше случаями производства неравновесности для группы III. Многообразие состояний неравновесной системы, классификация которых была проведена в рамках ограничен-

ной модели перекрестной компенсации асимметричного типа, указывает на возможность обнаружения в этой системе разнообразных явлений, в частности, появление новых инвариантов движения.

2. ИВАРИАНТ ДВИЖЕНИЯ $W+S$

В рамках общей модели компенсации [9], когда величина $\xi_i \neq 0$ ($\xi_i = \frac{\partial \varphi_i}{\partial t} + \frac{d_q \varphi_i}{dt}$, φ_i – потенциалы термодинамических полей [9]), исследуем возможность появления в P -пространстве нового инварианта движения, определяющего сумму функции неравновесности и энтропии. Вычитая выражение (31) из (29) (см. [9]) и учитывая формулы (28), (30) и (32) (см. [9]), найдем, что выполняется равенство:

$$\frac{D(W+S)}{dt} = \sum_{i=1}^3 (\zeta_i \ddot{q}_i + \varphi_i \dot{q}_i - \xi_i q_i), \quad (1)$$

где управляющими параметрами (коэффициенты дифференциального уравнения) являются: частная производная от функции неравновесности W по обобщенной скорости \dot{q}_i (величина ζ_i), потенциал i -ого термодинамического поля (коэффициент φ_i , см. [9, п. 2]) и его кинетическое изменение (параметр ξ_i , формула (33) из [9]). Формула (1) показывает, что величина $W+S$ является инвариантом движения, например, при выполнении дифференциального уравнения

$$\zeta_i \ddot{q}_i + \varphi_i \dot{q}_i - \xi_i q_i = 0, \quad (2)$$

Если ограничиться поиском условий, при которых наблюдается экспоненциальный рост или убыль экстенсивных характеристик, то решение уравнения (2) можно искать в виде

$$q_i = \exp(\int \eta_i(t) dt). \quad (3)$$

Подстановка (3) в (2) приводит к уравнению

$$\zeta_i \dot{\eta}_i = -(\zeta_i \eta_i^2 + \varphi_i \eta_i - \xi_i), \quad (4)$$

из которого следует, что постоянство функции $\eta_i(t)$ (или экспоненциальное изменение экстенсивных величин) связано с обра-

щением в нуль правой части уравнения (4). Вид решения уравнения

$$\zeta_i \eta_i^2 + \varphi_i \eta_i - \xi_i = 0 \quad (5)$$

задается значением дискриминанта Δ_i .

Если управляющие параметры постоянны, то в зависимости от значения дискриминанта $\Delta_i = \varphi_i^2 + 4\zeta_i \xi_i$ уравнение (2) имеет следующие решения:

а) $\Delta_i < 0$:

$$q_i = e^{\alpha_i t} (C_{1i} \cos(\beta_i t) + C_{2i} \sin(\beta_i t)); \quad (\alpha_i = -0,5\varphi_i/\zeta_i; \quad \beta_i = 0,5\sqrt{|\Delta_i|}/\zeta_i); \quad (6)$$

б) $\Delta_i = 0$:

$$q_i = e^{\alpha_i t} (C_{1i} + C_{2i} t); \quad (7)$$

в) $\Delta_i > 0$:

$$q_i = C_{1i} e^{\gamma_{1i} t} + C_{2i} e^{\gamma_{2i} t}; \quad (\gamma_{1,2i} = 0,5(-\varphi_i \mp \sqrt{\Delta_i})/\zeta_i). \quad (8)$$

Формула (6) в зависимости от знака коэффициента α_i определяет возникновение в неравновесной системе затухающих ($\alpha_i < 0$), стационарных ($\alpha_i = 0$) или нарастающих ($\alpha_i > 0$) временных периодических структур. Формула (7) соответствует затухающему ($\alpha_i < 0$), стационарному ($\alpha_i = 0$) или нарастающему ($\alpha_i > 0$) отклику неравновесной системы. Формула (8) описывает экспоненциальную реакцию системы с различными вариантами персистентности. Отметим, что по уравнению (2) обращению в нуль параметра ξ_i (модель перекрестной компенсации асимметричного типа) отвечает постоянство экстенсивных характеристик ($\dot{q}_i = 0$) или протекание обратимых превращений ($d_q S = 0$) в Q -пространстве. Следовательно, в общем случае формулы (6)–(8) определяют условия и характер экспоненциального изменения обобщенных термодинамических координат.

Таким образом, изменчивость управляющих параметров в уравнении (1) при выполнении условий (2) порождает разнообразие возможных состояний неравновесной системы, которые отличаются от иных состояний сохранением инварианта дви-

жения $W+S$. В этой связи возникает необходимость в рамках модели перекрестной компенсации асимметричного типа найти условия, при которых инвариант движения $W+S$ сохраняется в R -области P -пространства.

Пространственно-временная эволюция неравновесного состояния определяется скоростью изменения функции неравновесности и энтропии, т.е. производством неравновесности и энтропии в реальном пространстве-времени. В рамках модели перекрестной компенсации асимметричного типа [9] сохранение инварианта движения $W+S$ в R -пространстве, согласно формуле (27) из [9], определяется выражением:

$$\frac{d_r(W+S)}{dt} = -\sum_{i=1}^3 \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial t} q_i + \frac{\partial W}{\partial \dot{q}_i} \ddot{q}_i \right). \quad (9)$$

Правая часть равенства (9) обращается в нуль в ряде случаев: – экстенсивные характеристики сохраняются в Q -пространстве ($\dot{q}_i = 0$) при стационарности потенциалов термодинамических полей ($\partial \varphi_i / \partial t = 0$);

– экстенсивные характеристики изменяются с постоянной скоростью ($\dot{q}_i = C_i, i=1,2,3$), а потенциалы термодинамических полей не зависят от обобщенных термодинамических координат (все величины $\partial \varphi_i / \partial q_j = 0$), т.е. стационарны (см. формулу (33) из [9]);

– для всех характеристик ($i = 1, 2, 3$) выполняется система равенств, которая определяет стационарность потенциалов термодинамических полей ($\partial \varphi_i / \partial t = 0$) и отсутствие явной зависимости функции неравновесности от скоростей изменения обобщенных термодинамических координат ($\partial W / \partial \dot{q}_i = 0$)

$$\begin{cases} \partial \varphi_i / \partial t = 0 \\ \partial W / \partial \dot{q}_i = 0 \end{cases}, \quad (10)$$

– для всех величин справедливо соотношение $\frac{\partial \varphi_i}{\partial t} q_i + \frac{\partial W}{\partial \dot{q}_i} \ddot{q}_i = 0$

($i = 1, 2, 3: \partial \varphi_i / \partial t \neq 0, \partial W / \partial \dot{q}_i \neq 0, \dot{q}_i \neq C_i$).

– выполняется равенство ($i = 1, 2, 3 : \partial \varphi_i / \partial t \neq 0, \partial W / \partial \dot{q}_i \neq 0, \dot{q}_i \neq C_i$)

$$\sum_{i=1}^3 \left(q_i \frac{\partial \varphi_i}{\partial t} + \frac{\partial W}{\partial \dot{q}_i} \ddot{q}_i \right) = 0. \quad (11)$$

Три первых из указанных случаев описывают ситуации со стационарными ($\partial \varphi_i / \partial t = 0$), а два оставшихся случая – с нестационарными ($\partial \varphi_i / \partial t \neq 0$) потенциалами термодинамических полей. Пусть для всех описанных вариантов функция неравновесности постоянна и равна константе W_0 (при этом $d_r S = 0$, т.е. в R -пространстве протекают обратимые процессы). Если величина $W_0 = 0$, то система находится в стабильном состоянии, отвечающем термодинамическому равновесию. При значении параметра $W_0 \neq 0$ ее состояние метастабильное, т.е. система неустойчива по отношению к малым флуктуациям характеристик. Следовательно, неравновесная система может длительное время пребывать в устойчивом состоянии со стационарными потенциалами ($\partial \varphi_i / \partial t = 0$) термодинамических полей (стационарное состояние) или в метастабильном состоянии при постоянном ненулевом значении функции неравновесности в случае нестационарных интенсивных величин ($\partial \varphi_i / \partial t \neq 0$). Последнее состояние, несмотря на нестационарность, может быть устойчивым, т.е. оно отвечает динамическому равновесию.

Таким образом, формулы (22)–(35) из [9] и (1)–(11) описывают переход системы к новому равновесному ($DW \rightarrow 0$) состоянию за счет уменьшения производства энтропии в результате протекания обратимых ($DS = 0$) или необратимых ($DS \neq 0$) процессов. Транспортные явления сопровождаются возникновением потоков неравновесных характеристик, которые приводят к перераспределению энергии и вещества в системе. Поэтому рассмотрим потоки неравновесных экстенсивных аргументов в реальном пространстве-времени и потоки интенсивных величин в термодинамической фазовой области расширенного пространства.

3. ПОТОК НЕРАВНОВЕСНОГО i -ОГО ЭКСТЕНСИВНОГО АРГУМЕНТА q_i . ПЕРИОДИЧЕСКИЕ ИЗМЕНЕНИЯ ЭКСТЕНСИВНОЙ ПЕРЕМЕННОЙ

В R -пространстве протекание конкурирующих между собой необратимых процессов приводит к разбиению неравновесной системы на совокупность локальных областей, в которых наблюдаются флуктуации термодинамических величин и характеристических функций. Они вызывают постоянное спорадическое отклонение положения центра масс локальной области (целлы) от равновесного значения. Поэтому местоположение целлы со значением термодинамической координаты q_i i -ого экстенсивного аргумента задается средним значением радиуса-вектора $\mathbf{r}_{(i)}$. Скорость перемещения центра масс локальной области определяется формулой $\mathbf{v}_{(i)} = d\mathbf{r}_{(i)}/dt$. Движение целлы происходит в направлении, противоположном градиенту i -ой величины, вызывающего пространственное смещение локальной области. Таким образом, поток аргумента q_i равен:

$$\mathbf{J}_i = q_i \mathbf{v}_{(i)} = \frac{d(q_i \mathbf{r}_{(i)})}{dt} - \mathbf{r}_{(i)} \frac{dq_i}{dt} = \frac{d(q_i \mathbf{r}_{(i)})}{dt} - \mathbf{r}_{(i)} \frac{\partial q_i}{\partial t} - \mathbf{r}_{(i)} (\mathbf{v}_{(i)} \nabla q_i) =$$

(ниже использована формула [10, с. 20]:

$$[[\mathbf{A} \times \mathbf{B}] \times \mathbf{C}] = \mathbf{B}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{C}) - \mathbf{A}(\mathbf{B} \cdot \mathbf{C}))$$

$$= \frac{d(q_i \mathbf{r}_{(i)})}{dt} - \mathbf{r}_{(i)} \frac{\partial q_i}{\partial t} + [[\mathbf{r}_{(i)} \times \nabla q_i] \times \mathbf{v}_{(i)}] - (\mathbf{r}_{(i)} \mathbf{v}_{(i)}) \nabla q_i = -(\mathbf{r}_{(i)} \mathbf{v}_{(i)}) \nabla q_i = -k_i \nabla q_i, \quad (12)$$

где подчеркнутое выражение равно нулю (иная форма записи равенства (12)), а $k_i = \mathbf{r}_{(i)} \mathbf{v}_{(i)}$ – i -тый коэффициент пропорциональности. Согласно линейной теории Онзагера (см., напр., [11]), кинетические коэффициенты k_i являются положительными величинами. Поэтому формула (12) показывает, что вектор скорости $\mathbf{v}_{(i)}$ движения целлы коллинеарен вектору градиента ∇q_i экстенсивной величины q_i и противоположен ему по направлению.

Транспорт энергии и вещества локальной областью может привести к возникновению обратимых во времени явлений, например, периодических изменений экстенсивных функций в R -пространстве. Эти феномены порождаются явной зависимостью потока экстенсивного параметра от времени, т.е. являются динамической составляющей необратимого процесса.

Пусть целла с локально сохраняющейся (выполняется уравнение (7) из [9]) экстенсивной величиной q_i движется с постоянной скоростью $c_{(i)}$. Тогда легко показать, что поток J_i удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial J_i}{\partial t} + c_{(i)}^2 \nabla q_i = 0. \quad (13)$$

Совместное решение уравнений (7) из [9] (первое уравнение системы уравнений (14)) и (13)

$$\begin{cases} \frac{\partial q_i}{\partial t} + \operatorname{div} J_i = 0 \\ \frac{\partial J_i}{\partial t} + c_{(i)}^2 \nabla q_i = 0 \end{cases} \quad (14)$$

приводит к уравнениям гиперболического типа для экстенсивной характеристики q_i

$$\frac{\partial^2 q_i}{\partial t^2} = c_{(i)}^2 \Delta q_i \quad (15)$$

($\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ – оператор Лапласа) и ее потока J_i

$$\frac{\partial^2 J_i}{\partial t^2} = c_{(i)}^2 [\operatorname{rot}(\operatorname{rot} J_i) + \Delta J_i]. \quad (16)$$

Система уравнений (14) связывает необратимые во времени транспортные процессы с обратимыми периодическими во времени перемещениями. Формулы (15) описывают периодические изменения термодинамических величин. Возникновение, например, периодических изменений экстенсивной величины при постоянном коэффициенте пропорциональности (формула (12)) отображает стационарность потока этой характеристики, так как

$$\frac{\partial J_i}{\partial t} = -k_i \frac{\partial(\nabla q_i)}{\partial t}. \quad (17)$$

Согласно формуле (17) стационарность потока экстенсивной характеристики определяется обращением в нуль смешанной производной (правая часть равенства (17)), вид которой может быть приведен к виду уравнения (15) с помощью преобразования Лоренца [13, с.58]. В заключение этого пункта можно отметить, что неоднородная система уравнений вида (14) может послужить основой для построения теории иерархических изменений в неравновесной системе.

4. ЭВОЛЮЦИЯ ПОТЕНЦИАЛОВ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ

Интенсивные характеристики неравновесной системы изменяются в Q -области расширенного пространства, при этом они удовлетворяют уравнению:

$$\frac{\partial \varphi_i}{\partial t} + \sum_{j=1}^3 \left[\frac{\partial I_{ij}}{\partial q_j} + \frac{d_q}{dt} \frac{\partial I_{ij}}{\partial \dot{q}_j} \right] = \pi_i, \quad (18)$$

где $I_{ij} = \varphi_i \dot{q}_j$ – составляющие матрицы j -тых компонентов i -ого потока потенциала φ_i термодинамического поля в Q -пространстве; величина:

$$\pi_i = \sum_{j=1}^3 \left(\dot{q}_j \frac{d_q}{dt} \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial \dot{q}_j} \right) + \varphi_i \delta_{ij} \right), \quad (19)$$

описывает производство (утилизацию) потенциала вида i . Наличие в формуле (18) слагаемых $\sum_{j=1}^3 \left[\frac{\partial I_{ij}}{\partial q_j} + \frac{d_q}{dt} \frac{\partial I_{ij}}{\partial \dot{q}_j} \right]$ эйлеровского вида указывает на возможность их минимизации (обращения в нуль) при тривиальном значении вариации $\delta_q \int I_{ij} dt = 0$ в Q -пространстве. Иная форма записи производства потенциала φ_i вида i (формула (19)):

$$\pi_i = \sum_{j=1}^3 \left[\frac{d_q}{dt} \frac{\partial I_{ij}}{\partial \dot{q}_j} - \frac{\partial \varphi_i}{\partial \dot{q}_j} \ddot{q}_j \right] \quad (20)$$

Из формулы (20) следует:

$$\frac{d_q}{dt} \operatorname{div}_q \mathbf{I}_i = (\ddot{\mathbf{q}}_{(i)} \nabla_q) \varphi_i, \quad (21)$$

где поток $\mathbf{I}_i = \varphi_i \dot{\mathbf{q}}_{(i)}$ ($\dot{\mathbf{q}}_{(i)} = \sum_{j=1}^3 \dot{q}_{j(i)} \mathbf{e}_j$ и $\ddot{\mathbf{q}}_{(i)}$ – скорость перемещения и ускорение элемента фазовой области с потенциалом φ_i ; \mathbf{e}_j – орты термодинамических осей; $\operatorname{div}_q \mathbf{I}_i = \sum_{j=1}^3 \frac{\partial I_{ij}}{\partial \dot{q}_j}$ – расходимость векторных линий потока \mathbf{I}_i в пространстве обобщенных скоростей), соответствует отсутствию производства (утилизации) $\pi_i = 0$ потенциала φ_i .

В общем случае производство энтропии в Q -пространстве задается формулой (см. (30) из [9]):

$$\frac{d_q S}{dt} = I_{1S} + \sum_{i=1}^3 \left[\frac{\partial S}{\partial \dot{q}_i} \ddot{q}_i \right]. \quad (22)$$

Если энтропия не зависит явным образом от обобщенных скоростей \dot{q}_i или эти скорости постоянны, то сумма элементов с одинаковыми индексами матрицы компонентов потоков определяет производство энтропии в Q -пространстве:

$$\frac{d_q S}{dt} = \sum_{i=1}^3 \varphi_i \dot{q}_i = I_{1S}. \quad (23)$$

В сопряженном пространстве потенциалов термодинамических полей составляющие матрицы j -тых компонентов i -ого потока экстенсивной величины определим формулой $P_{ij} = -q_i \dot{\varphi}_j$. Тогда производство функции неравновесности в Q -пространстве равно

$$\frac{d_q W}{dt} = P_{1W} + \sum_{i=1}^3 \left[\frac{\partial W}{\partial \dot{q}_i} \ddot{q}_i \right], \quad (24)$$

где линейный инвариант функции неравновесности $P_{1W} = -\sum_{i=1}^3 q_i \dot{\varphi}_i$.

Таким образом, в Q -пространстве разность между производствами энтропии и функции неравновесности (с учетом формулы (28) из [9]) задается разностью между линейными инвариантами соответствующих матриц

$$\frac{d_q S}{dt} - \frac{d_q W}{dt} = I_{1S} - P_{1W} . \quad (25)$$

Используя формулы (19) и (33) из [9], можно записать линейные инварианты введенных матриц в виде:

$$I_{1S} = \frac{DS}{dt} - \sum_{i=1}^3 \varphi_i \frac{d_r q_i}{dt} , \quad (26)$$

$$P_{1W} = -\frac{d_r S}{dt} + \sum_{i=1}^3 q_i \frac{d_r \varphi_i}{dt} . \quad (27)$$

Формулы (26) и (27) показывают, что линейный инвариант энтропии определяется процессами в P -пространстве, а линейный инвариант функции неравновесности – только в R -пространстве. Разность формул (26) и (27) (при учете производной по времени в R -пространстве от формулы (18) из [9]) равна

$$I_{1S} - P_{1W} = \frac{DS}{dt} + \frac{d_r W}{dt} . \quad (28)$$

Из формулы (28) следует: равенство линейных инвариантов энтропии и неравновесности приводит к компенсации производства энтропии в P -пространстве производством функции неравновесности в R -пространстве. В этом случае процессы в неравновесной системе описываются моделью перекрестной компенсации симметричного типа (соотношения (34) и (35) из [9]). При постоянных скоростях изменения экстенсивных величин ($\dot{q}_j = C_j$) уравнение (18) распадается на два равенства (см. формулы (18) и (20))

$$\begin{cases} \frac{\partial \varphi_i}{\partial t} + \sum_{j=1}^3 \frac{\partial I_{ij}}{\partial q_j} = 0 \\ \sum_{j=1}^3 \frac{d_q}{dt} \left(\frac{\partial I_{ij}}{\partial \dot{q}_j} \right) = \pi_i \end{cases} . \quad (29)$$

Согласно (29), кинетическая перестройка потенциалов термодинамических полей неравновесной системы, происходит в силу их нестационарности и возникновения потоков в термодинамической фазовой области P -пространства. Первое уравнение системы (29) можно переписать в векторной форме:

$$\frac{\partial \varphi_i}{\partial t} + \operatorname{div}_q \mathbf{I}_i = 0, \quad (30)$$

где $\operatorname{div}_q \mathbf{I}_i = \sum_{k=1}^3 \frac{\partial I_{ik}}{\partial q_k}$ – расходимость векторных линий потока \mathbf{I}_i в пространстве обобщенных координат. Уравнение (30) имеет вид закона локального сохранения потенциала φ_i в термодинамическом фазовом пространстве.

Поток интенсивной величины возникает под действием ее градиента в Q -пространстве, поэтому, согласно формуле (12), можно записать, что матричные элементы I_{ij} равны:

$$I_{ij} = -\Omega_i \frac{\partial \varphi_i}{\partial q_j}, \quad (31)$$

где Ω_i – кинетический коэффициент i -ого типа. Для постоянно-го коэффициента Ω_i однородное ($\pi_i = 0$) уравнение (18) принимает вид

$$\frac{\partial \varphi_i}{\partial t} = \Omega_i \left(\Delta_q \varphi_i + \sum_{j=1}^3 \frac{d_q}{dt} \left(\frac{\partial^2 \varphi_i}{\partial \dot{q}_j \partial q} \right) \right), \quad (32)$$

здесь $\Delta_q = \sum_{j=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial q_j^2}$ – оператор Лапласа в Q -пространстве. Первое

слагаемое в правой части уравнения (32) может описывать возникновение фрактальных объектов (см., напр., пункты 8.2 и 8.3 работы [14]), а второе – различных динамических эффектов. При выполнении условия (21), учете равенства (31) и переменном коэффициенте Ω_i однородное уравнение (18) принимает вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi_i}{\partial t} = \sum_{j=1}^3 \left[a_{ij} \frac{\partial \varphi_i}{\partial q_j} + b_{ij} \frac{\partial^2 \varphi_i}{\partial q_j^2} + c_{ij} \frac{\partial^2 \varphi_i}{\partial \dot{q}_j \partial q_j} + \Omega_i \frac{d_q}{dt} \left(\frac{\partial^2 \varphi_i}{\partial \dot{q}_j \partial q_j} \right) + \right. \\ \left. + \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^3 \left(e_{ijk} \frac{\partial^2 \varphi_i}{\partial q_j \partial q_k} + f_{ijk} \frac{\partial^2 \varphi_i}{\partial q_j \partial \dot{q}_k} \right) \right], \quad (33) \end{aligned}$$

где параметры $a_{ij} = \frac{\partial \Omega_i}{\partial q_j} + \frac{d_q}{dt} \left(\frac{\partial \Omega_i}{\partial \dot{q}_j} \right)$; $b_{ij} = \Omega_i + \dot{q}_j \frac{\partial \Omega_i}{\partial \dot{q}_j}$;

$c_{ij} = \ddot{q}_j \frac{\partial \Omega_i}{\partial \dot{q}_j} + \frac{d_q \Omega_i}{dt}$; $e_{ijk} = \dot{q}_k \frac{\partial \Omega_i}{\partial \dot{q}_j}$; $f_{ijk} = \ddot{q}_k \frac{\partial \Omega_i}{\partial \dot{q}_j}$ определяются зави-

симостью кинетического параметра Ω_i i -ого типа от экстенсивных обобщенных координат q_i и скоростей их изменения \dot{q}_i .

Решение некоторых частных случаев уравнения (33) приведены в работе [15]:

а) отметим, что автомодельное решение уравнения параболического типа (диффузия и др.)

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = b \frac{\partial^2 \varphi}{\partial q^2}$$

может приводить к потенциалу вида (здесь и далее по тексту величины C_i , a_i и b_i – постоянные величины)

$$\varphi(\xi) \approx a_1 \xi \exp(-b_1 \xi^2), \quad (34)$$

где $\xi = q^2 / \tau$, константы интегрирования $a_1 = 2C_1$ и $b_1 = 0.25$ связаны с параметрами исследуемой среды (см. [15]). Применение к уравнению метода Фурье (метода разделения переменных) дает для потенциала φ выражение

$$\varphi = \exp(-\lambda^2 \tau) [C_1 \cos(\lambda q) + C_2 \sin(\lambda q)],$$

(λ – параметр разделения, связанный с характерным временем процесса) которое описывает возникновение диссипативных (потенциал убывает с ростом времени) периодических структур в Q -области расширенного пространства;

б) если локальная скорость изменения потенциала термодинамического поля определяется в Q -пространстве смешанной производной потенциала по обобщенным координате и скорости, то уравнение разрушения имеет вид:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial \tau^2} = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \dot{q}^2} - \frac{\partial^2 \varphi}{\partial q^2},$$

а стационарное решение (при $\partial \varphi / \partial t = 0$ после введения преоб-

разования Лоренца $q_1 = \frac{\dot{q} - u \tau}{\sqrt{1 - u^2}}$ [15]) в качестве слагаемого со-

держит потенциал Людвика φ_L [16]:

$$\varphi = \varphi_L + a_2 \ln \left[1 - \left(\frac{q_1}{b_2} \right)^2 \right], \quad (35)$$

где $\varphi_L = 2C_1 \ln |\dot{q}_1| + C_2$ ($C_1, a_2 = C_1$ и b_2 – константы интегрирования [15], причем параметр $b_2 = \dot{q}_1$ определяет постоянную скорость разрушения). Стационарность потенциала термодинамического поля неравновесной системы существует в ограниченной области изменения экстенсивной величины ($(q_1 / b_2)^2 < 1$), т.е. вне этой области его стационарность может разрушаться. Аналогичная картина наблюдается при деформировании материалов, когда приложенная внешняя энергия не только преобразует внутреннюю структуру, но и вызывает появление новых поверхностей раздела (пор, микротрещин и т.д.), т.е. разрушение (фрактуризация) материала [17]. Поиск решения нестационарного уравнения фрактуризации методом Фурье в виде $\varphi = T(\tau) \cdot Q(q)$ ($\tau = ct$, t – безразмерное время, $\zeta = \dot{q}_1^2 - q_1^2$, $\dot{q}_1 = \dot{q} + q$, $q_1 = \dot{q} - q$), приводит к формулам

$$T(\tau) = \exp(-\lambda^2 \tau), \quad Q(\zeta) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \zeta^n, \quad (36)$$

где λ – константа, определяемая из начальных и граничных условий. Коэффициенты ряда удовлетворяют рекуррентному соотношению

$$4(n+1)^2 a_{n+1} + \lambda^2 a_n = 0. \quad (37)$$

Полагая коэффициент $a_0 = 1$, получим решение в виде

$$Q(\zeta) = 1 - \left(\frac{\lambda}{2} \right)^2 \zeta + \left(\frac{\lambda}{2} \right)^4 \frac{\zeta^2}{4} - \left(\frac{\lambda}{2} \right)^6 \frac{\zeta^3}{36} + \dots \quad (38)$$

Из выражения (38) видно, что, например, при $\zeta = 1.5$ и значениях параметра $|\lambda| \ll 2$ коэффициенты ряда быстро убывают до нуля, а при выполнении противоположного равенства ($|\lambda| \gg 2$) – они возрастают до очень больших значений. Таким образом, значение параметра $|\lambda| = 2$ является пороговым и определяет точку ветвления, после прохождения которой меняется поведение нестационарного потенциала разрушения;

в) согласно (17), условием стационарности потока интенсивной характеристики является постоянство во времени градиента потенциала в Q -пространстве

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial t \partial q} = 0, \quad (39)$$

Вводя переменные (u – скорость перемещения волны потенциала) $\tau = t + \frac{q}{u}$, $q_1 = q - ut$, перепишем (39) в виде

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial \tau^2} - u^2 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial q_1^2} = 0. \quad (40)$$

Уравнение (40) описывает продольную волну потенциала термодинамического поля, которая распространяется со скоростью u вдоль оси q_1 . Уравнение (40) в термодинамическом фазовом пространстве имеет вид ($\tau_1 = u\tau$)

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial \tau_1^2} = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial q^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \dot{q}^2}. \quad (41)$$

Введение нового аргумента Лоренца [13, 18] $\dot{q}_1 = \frac{\dot{q} - v\tau_1}{\sqrt{1 - v^2}}$ (v – безразмерная скорость перемещения одной системы отсчета относительно другой вдоль оси обобщенных скоростей \dot{q}) позволяет преобразовать уравнение (41) к виду

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial q^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \dot{q}_1^2} = 0. \quad (42)$$

Решение уравнения (42) определяется такой же функцией, как и движение дислокаций в обычном пространстве [18]

$$\varphi = a_3 \operatorname{arctg}(b_3 q), \quad (43)$$

где $a_3 = C_1$ и $b_3 = q_1^{-1}$ – константы интегрирования [15].

Суммарное действие потенциалов (34), (35) и (43) позволяют описать определенные отклики синергетической системы. В частности, в работе [15] развитый формализм был применен к описанию возникающего напряжения в материале в зависимости от деформации. Результаты моделирования механических состояний приведены в работе [15].

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе предложена модель неравновесной термодинамической системы, определяемая любым известным термодинамическим потенциалом при добавлении потенциала энтропии неравновесности. Предложенная термодинамическая концепция неравновесности в предельных случаях дает переход к известным результатам равновесной термодинамики. С другой стороны предлагаемая модель позволяет получать новые физические представления неустойчивых состояний синергетических систем, провести их классификацию и исследовать частные случаи эволюционных преобразований. Переструктурирование системы может сопровождаться сохранением определенных величин, что указывает на возникновение нового вида симметрии. В результате взаимодействия кинетического и динамического подуровней в системе могут зарождаться продольные и поперечные волны термодинамических величин. В случае динамического равновесия с внешней средой система может строить иерархии необратимых процессов.

В рамках одной из моделей компенсации неравновесности были получены кинетические уравнения для частных случаев потенциалов термодинамических полей. Получены явные зависимости в частных случаях для потенциалов разрушения и волнового перемещения от сопряженной обобщенной координаты. Сумма этих потенциалов позволяет смоделировать различные отклики синергетической системы, которые будут рассмотрены в следующей работе, на внешние воздействия.

1. *В.Эбелинг*, Образование структур при необратимых процессах. Введение в теорию диссипативных структур, Мир, Москва (1979).
2. *А.М. Жаботинский*, Концентрационные автоколебания, Наука, Москва (1974).

3. *А.Г. Хачатурян*, Теория фазовых превращений и структура твердых растворов, Наука, Москва (1974).
4. *Е.Ф. Мищенко, В.А. Садовничий, А.Ю. Колесов, Н.Х. Розов*, Автоволновые процессы в нелинейных средах с диффузией, ФИЗМАТЛИТ, Москва (2005).
5. *А.Г. Шашков, В.А. Бубнов, С.Ю. Яновский*, Волновые явления теплопроводности: Системно-структурный анализ, Едиториал УРСС, Москва (2004).
6. *Г. Кольский*, Волны напряжения в твердых телах, Иностранная литература, Москва (1955).
7. *Р.М. Дэйвис*, Волны напряжения в твердых телах, Иностранная литература, Москва (1961).
8. *В.И. Ерофеев*, Волновые процессы в твердых телах с микроструктурой, МГУ, Москва (1999).
9. *С.В. Терехов, В.Н. Варюхин, Т.Н. Мельник, В.М. Юрченко*, ФТВД 27, № 1, 103 (2017).
10. *А.И. Борисенко, И.Е. Тарапов*, Векторный анализ и начала тензорного исчисления, Вища школа, Харьков (1986).
11. *И.П. Базаров, Э.В. Геворкян, П.Н. Николаев*, Неравновесная термодинамика и физическая кинетика, МГУ, Москва (1989).
12. *Ф.М. Морс, Г. Фешбах*, Методы теоретической физики, Т.1, ИИЛ, Москва (1958).
13. *А.Х. Коттрелл*, Дислокации и пластическое течение в кристаллах, Гос. науч.-техн. изд-во лит. по черн. и цв. метал., Москва (1958).
14. *С.В. Терехов*, Фракталы и физика подобия, Цифровая типография, Донецк (2011).
15. *С.В. Терехов, В.Н. Саятин*, ФТВД 24, № 3-4, 39 (2014).
16. Физическое металловедение, Т.2. Фазовые превращения в металлах и сплавах и сплавы с особыми физическими свойствами. / Под ред. Р.У. Кана, П.Т. Хаазена, Металлургия, Москва (1987).
17. *Ю.Г. Матвиенко*, Модели и критерии механики разрушения,

ФИЗМАТЛИТ, Москва (2006).

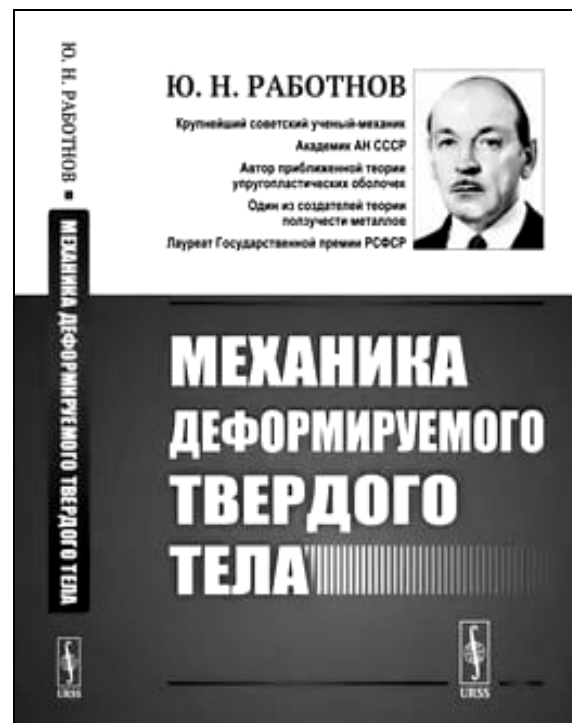
18. А. Коттрел, Теория дислокаций, Мир, Москва (1969).

*Terekhov S.V., Varyouhin V.N., Melnik T.N., Petrenko A.G.,
Yurchenko V.M.*

THERMODYNAMIC CONCEPT OF NON-EQUILIBRIUM. II. STATES OF THE NON-EQUILIBRIUM SYSTEM AND THEIR EVOLUTION

Within the framework of model of indemnification of non-equilibrium, classification of the states of the synergetics system is carried out. The existence of new invariant of motion is set, that is a sum of the function of non-equilibrium and the entropy of the system. Intercommunication of kinetic and dynamic processes is shown, that gives rise to periodic changes of intensive and extensive parametr in a synergetic system. The equations of evolution of the potentials of the thermodynamics fields are obtained and explicit dependencies of these potentials on conjugate extensive characteristics and the rate of its change are found.

Keywords: thermodynamics system, non-equilibrium, self-organization, entropy, irreversible processes



48. Физика и техника высоких давлений.

Донецк, 2018, т. 28, № 1, с. 5-12

PACS: 62.20.F–; 62.20.fg; 62.30.+d; 81.40.Jj

*Терехов С.В.¹, Варюхин В.Н.¹, Мельник Т.Н.¹, Петренко А.Г.²,
Юрченко В.М.¹*

**ТЕРМОДИНАМИЧЕСКАЯ КОНЦЕПЦИЯ НЕРАВНОВЕСНОСТИ.
III. РЕАКЦИЯ СИСТЕМЫ. ВОЗНИКНОВЕНИЕ ИЕРАРХИЙ**

¹Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина

²Донецкий национальный университет

Статья поступила в редакцию 1 июня 2017 года

Показано, что различные отклики неравновесной системы на внешнее воздействие можно смоделировать с помощью потенциалов термодинамических полей. Проведено сравнение экспериментальных и теоретических диаграмм напряжение-деформация для металлов и пластмасс. Предложена схема возникновения бесконечной и конечной иерархии необратимых процессов.

Ключевые слова: термодинамическая система, неравновесность, самоорганизация, энтропия, необратимые процессы

1. ВВЕДЕНИЕ: ОТКЛИК НЕРАВНОВЕСНОЙ СИСТЕМЫ

Реакция неравновесной системы на внешнее воздействие проявляется в виде отклика, который можно отобразить с помощью потенциалов термодинамических полей [1, 2]. Использование преобразований системы отсчета в Q -области расширенного пространства (обозначения и определения приведены в [2]), а также сумма указанных потенциалов позволяет смоделировать зависимость среднего (в силу того, что локальные области системы обладают отличающимися друг от друга параметрами, а

процессы имеют противоборствующий характер) интенсивного потенциала от его сопряженного экстенсивного аргумента. Диаграммы отклика неравновесной системы на различные внешние воздействия имеют, например, вид (рис. 1): резонансов (например, резонансное поглощение световой энергии валентными электронами структуры стекловолокна [3, рис. 3.23]); фрактального роста потенциала, характерного для вольт-амперных характеристик структур на сферических металлических кластерах [3; 4, рис. 2]; шумов со степенной зависимостью спектра мощности [5; 6, рис. 1.9], которые возникают в системах с различной физической природой; реакции упруго-пластического материала на деформацию [7; 8, рис. 1.1].

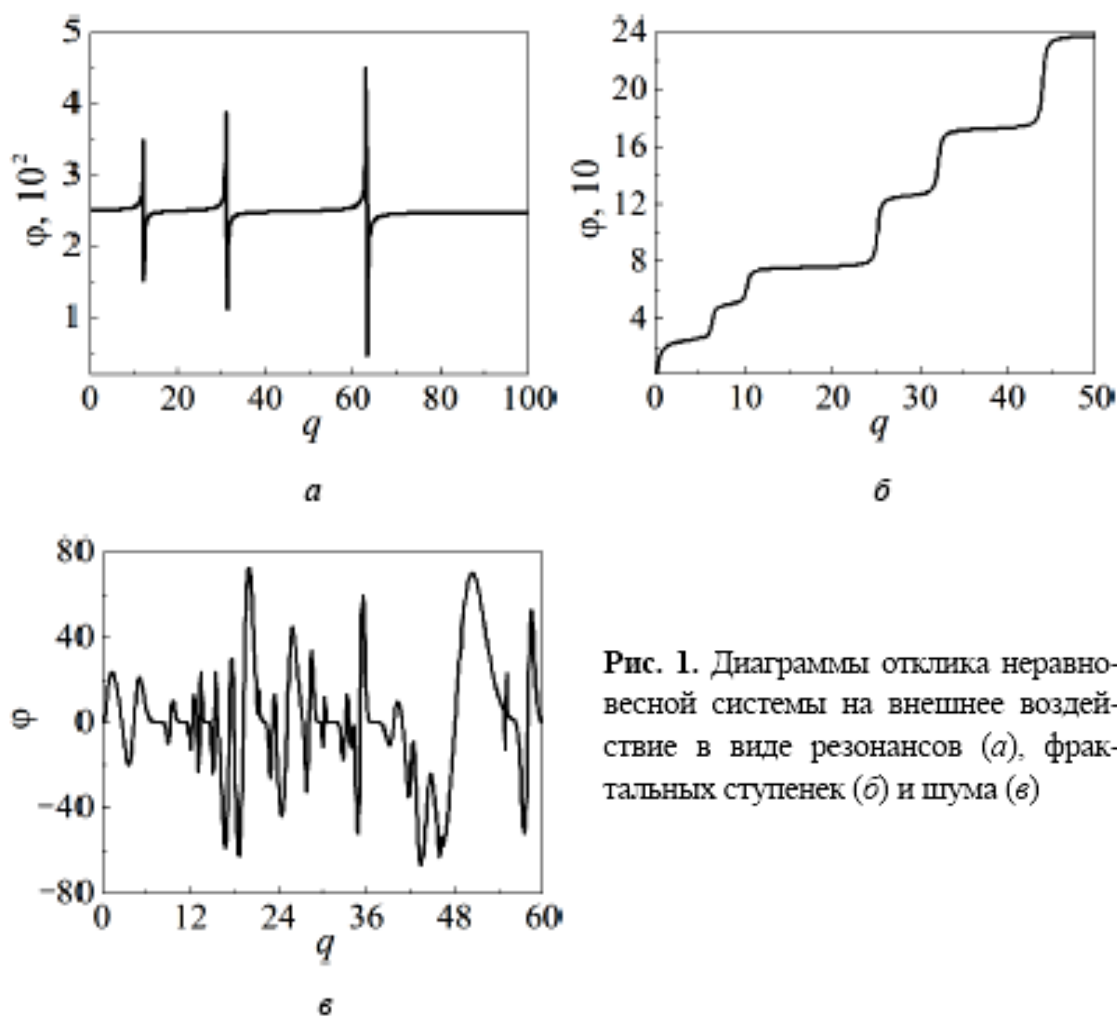


Рис. 1. Диаграммы отклика неравновесной системы на внешнее воздействие в виде резонансов (а), фрактальных ступенек (б) и шума (в)

Разнообразие откликов неравновесной системы на внешнее воздействие демонстрирует *универсальный* характер потен-

циалов термодинамических полей. В частности, различные сочетания параметров модели позволяют строить кривые зависимости приложенного напряжения σ от деформаций ξ [9] и скоростей их изменения $\dot{\xi}$. Механическое состояние материала определяется характеристиками его структуры (упругостью, хрупкостью, вязкостью, пластичностью) и протекающими при деформировании процессами (блужданиями частиц и их колебаниями вблизи равновесных положений; возникновением волн и самоорганизующихся структур; наличием потоков и различного рода течений) [10]. Следует отметить, что похожие между собой диаграммы напряженного состояния неравновесной системы возникают при разных способах деформирования материала, например, при сдвиге и кручении [10], а также при реализации различных процессов на более низком уровне организации материи. В данной работе макроповедение материала отображается с помощью феноменологической модели [1, 2], для которой численные значения параметров найдены по экспериментальным данным.

2. ДИАГРАММЫ МЕХАНИЧЕСКИХ СОСТОЯНИЙ РЕАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Диаграммы состояния для кристаллов с дефектами различной размерности были получены авторами для термодинамического потенциала с учетом полей деформации. Теоретические аналоги экспериментальных диаграмм напряжение $\sigma(\varepsilon)$ – деформация ε для алюминия (рис. 2, кривая 1) и стали 18Х2Н4МА (кривая 2) [12, с. 120] рассчитывали по формулам:

$$\sigma(\xi) = 10 \operatorname{arctg}(0,01\xi) + 6 \operatorname{arctg}(0,2\xi),$$

$$\sigma_1(\xi) = 1,4\xi \exp(-0,02\xi^2) + 89 \operatorname{arctg}(1,9\xi) + \operatorname{arctg}(0,007\xi) + \ln \left[1 - \left(\frac{\xi}{88} \right)^2 \right].$$

Теоретические формулы позволяют описывать диаграммы напряжение-деформация не только металлов и сплавов, но и других материалов, например, пластмасс. На рис. 3,а показаны те-

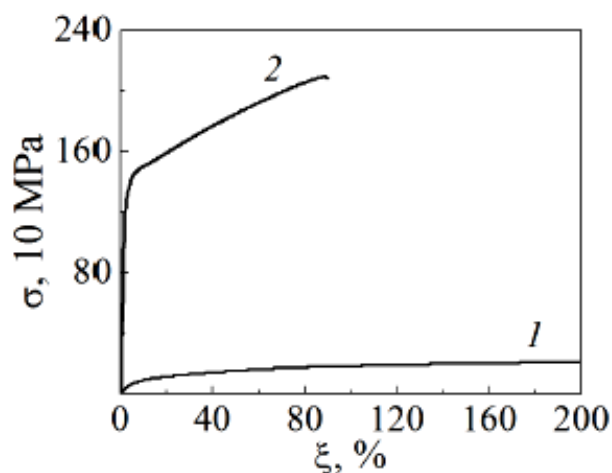


Рис. 2. Теоретические диаграммы напряжение σ –истинное удлинение ξ для алюминия (кривая 1) и стали 18X2H4MA (кривая 2)

оретические кривые для полистирола, экспериментальные данные для которых приведены в [13, с. 398]. Вычисления напряжений для полистирола (кривая 1) и ударопрочного полистирола (кривая 2) проводили соответственно по формулам:

$$\sigma(\xi) = \xi \exp(-0,09\xi^2) + 3,3 \operatorname{arctg}(0,74\xi) + 0,01 \ln \left[1 - \left(\frac{\xi}{2,2} \right)^2 \right],$$

$$\sigma(\xi) = 0,17 \xi \exp(-0,09\xi^2) + 1,62 \operatorname{arctg}(0,74\xi) + 0,22 \operatorname{arctg}(24\xi).$$

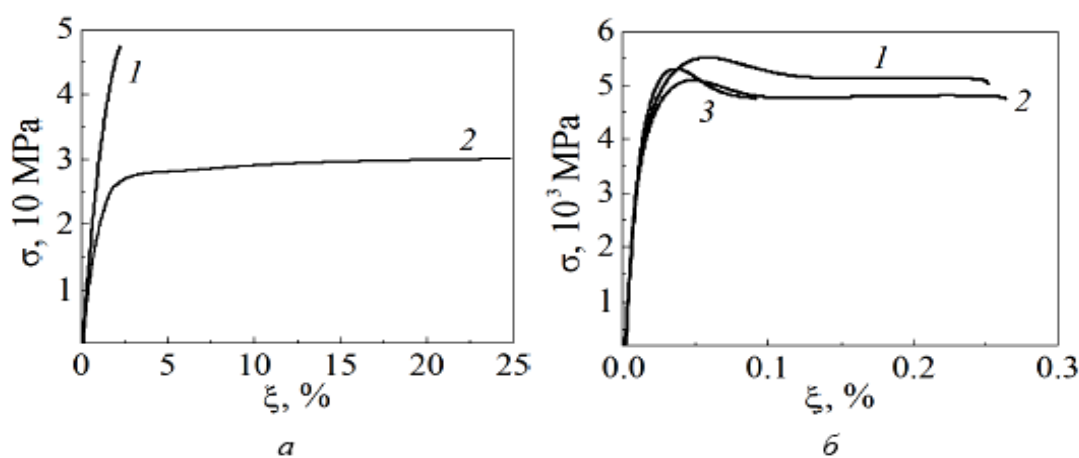


Рис. 3. Теоретические диаграммы напряжение σ –деформация ξ : а – для полистирола (кривая 1) и ударопрочного полистирола (кривая 2); б – для пиралина: 1 – 0,007, 2 – 0,3 – 0,042 [14, с. 86]

На рис. 3,б приведены теоретические зависимости напряжения от деформации для пиралина, которые рассчитывали по формулам (экспериментальные кривые см. в [14, с. 86]):

$$\sigma_1(\xi) = 2560 \xi \exp(-250\xi^2) + 332 \operatorname{arctg}(145\xi) + 2,6 \ln \left[1 - \left(\frac{\xi}{0,25} \right)^2 \right];$$

$$\sigma_2(\xi) = 3300 \xi \exp(-400 \xi^2) + 320 \operatorname{arctg}(145 \xi) + 2 \ln \left[1 - \left(\frac{\xi}{0,26} \right)^2 \right];$$

$$\sigma_3(\xi) = 6300 \xi \exp(-700 \xi^2) + 325 \operatorname{arctg}(145 \xi) + 1.2 \ln \left[1 - \left(\frac{\xi}{0,09} \right)^2 \right].$$

Адекватность теоретических кривых экспериментальным данным для различных материалов отображает *универсальный* характер полученных зависимостей потенциалов термодинамических полей от обобщенных координат. Однако основным недостатком полученных выражений является отсутствие связи феноменологических коэффициентов с такими параметрами материалов, например, как модуль Юнга, коэффициент всестороннего сжатия и другими константами. Для ее нахождения необходимо развитие микроскопической теории неравновесных процессов или сравнение полученных соотношений с экспериментом в области малых деформаций, пластических течений с малой скоростью и медленной фактуризации материала. Одним из достоинств термодинамической концепции неравновесности является возможность построения иерархии необратимых процессов на основе системы неоднородных уравнений вида (14) из [1].

3. ИЕРАРХИЯ НЕОБРАТИМЫХ ПРОЦЕССОВ

Наличие в локальной области пространственно-временного континуума источников (стоков) обобщенных координат q_i (или потенциалов в термодинамическом фазовом пространстве) с интенсивностью σ_i и действие на целлу внешних термодинамических сил Y_i порождает возможность построения иерархических структур путем реализации самозацепляющихся процессов. Для построения простейшей модели иерархичности рассмотрим систему неоднородных уравнений вида (1.14) (первая цифра – номер литературного источника, а вторая – номер формулы из работы), записанную в безразмерных величинах

$$\begin{cases} \frac{\partial q_i}{\partial \tau} + \operatorname{div} \mathbf{J}_i = \sigma_i \\ \frac{\partial \mathbf{J}_i}{\partial \tau} + \nabla q_i = -\mathbf{Y}_i \end{cases}, \quad (1)$$

где $\tau = \frac{c_{(i)}t}{\tau_0}$ – безразмерное время; $c_{(i)}$ и τ_0 – характерные скорость процесса изменения независимой переменной типа i и время реакции системы;

$\mathbf{J}_i = q_i \frac{c_{(i)}}{c_{(i)}}$ – безразмерный поток обобщенного аргумента i . Подействуем на первое уравнение системы (1) оператором локальной производной по времени $\frac{\partial}{\partial \tau}$, а на второе уравнение – оператором расходимости div (с учетом тождества $\operatorname{div}(\nabla) \equiv \Delta$, $\Delta = \sum_{k=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial x_k^2}$ – оператор Лапласа). Из второго

установленного уравнения вычтем первое, получим неоднородное волновое уравнение Даламбера (см., напр., [14])

$$\square q_i = -\rho_i; \quad (2)$$

здесь $\square = \Delta - \frac{\partial^2}{\partial \tau^2}$ – оператор Даламбера, а величину

$$\rho_i = \operatorname{div} \mathbf{Y}_i + \frac{\partial \sigma_i}{\partial \tau}$$

можно интерпретировать как плотность «зарядов» типа i .

Если применить к первому уравнению системы (1) оператор Гамильтона ($\nabla = \sum_{k=1}^3 \mathbf{e}_k \frac{\partial}{\partial x_k}$), а ко второму уравнению – оператор локальной производной по времени $\frac{\partial}{\partial \tau}$, а затем вычесть

из первого установленного уравнения второе, то получим уравнение Даламбера для потока типа i :

$$\square \mathbf{J}_i + \operatorname{rot}(\operatorname{rot} \mathbf{J}_i) = -\mathbf{j}_i, \quad (3)$$

здесь величина $-\mathbf{j}_i = \frac{\partial \mathbf{Y}_i}{\partial \tau} + \nabla \sigma_i$ – плотность «тока» типа i .

Из определений плотностей «зарядов» и «токов» типа i в

(2) и (3) следует, что плотность источников σ_i и внешняя термодинамическая сила Y_i удовлетворяют системе уравнений (1), т.е.

$$\begin{cases} \frac{\partial \sigma_i}{\partial \tau} + \operatorname{div} Y_i = \rho_i \\ \frac{\partial Y_i}{\partial \tau} + \nabla \sigma_i = -j_i \end{cases} \quad (4)$$

Таким образом, появление волн в неравновесной системе указывает на порождение необратимыми процессами (1) новых неравновесных изменений (4). Повторное применение описанной процедуры к системе (4) приведет к появлению волновых уравнений для величин σ_i и Y_i , что указывает на возникновение нового необратимого процесса. Бесконечное копирование процедуры порождает неограниченную иерархию неравновесных процессов. Ограниченная иерархия изменений возникает в случае пропорциональности величин, описывающих вновь образующиеся источники и внешние силы, величинам предыдущих поколений необратимых процессов, т.е. при выполнении, например, равенств (λ – число) $\sigma_i = \lambda q_i$ и $Y_i = \lambda J_i$, которые являются частным случаем соотношения, полученного в рамках линейной теории Онзагера [15]. Из (4) видно, что выполнение указанных соотношений приводит для величин второго поколения необратимых процессов к равенствам $\rho_i = \lambda \sigma_i = \lambda^2 q_i$ и $j_i = \lambda Y_i = \lambda^2 J_i$. Следовательно, для n -ого поколения неравновесных процессов будут выполняться равенства

$$\rho_{i(n)} = \lambda \sigma_{i(n)} = \lambda^n q_i \quad \text{и} \quad j_{i(n)} = \lambda Y_{i(n)} = \lambda^n J_i. \quad (5)$$

Формулы (5) демонстрируют масштабирование исходных величин при переходе от одного поколения необратимых явлений к другому. При значении параметра $|\lambda| < 1$ иерархия неравновесных процессов с ростом номера поколения вырождается в распространение волны исходных величин при отсутствии «зарядов» и «токов» типа i . Если параметр $\lambda = 1$, то процесс явля-

ется самоподдерживающимся для исходных величин, а при $\lambda = -1$ – для зеркальных функций $-q_i$ и $-J_i$. В случае $|\lambda| > 1$ иерархия необратимых явлений при переходе с одного уровня на другой вызывает в неравновесной системе существенный рост «зарядов» и «токов» типа i , чему должна препятствовать внешняя среда, в которой также протекают транспортные процессы.

Следовательно, характерной чертой иерархий является образование (неограниченного или ограниченного) спектра частот волновых перемещений, отображающих реакцию неравновесной системы на изменения внешней среды. Бесконечный спектр частот наблюдается при динамических процессах типа турбулентности, эволюции биологических организмов и других, а ограниченный – при рождении солитонов, концентрационных волн и аналогичных образований. Рождение иерархических структур снимает противоречие между необратимостью во времени неравновесных процессов и обратимыми во времени волновыми перемещениями. Появление в неравновесной системе иерархических структур указывает на образование бесконечной или ограниченной цепочки событий со звеньями вида «случайные блуждания + изменения потоков во времени = волна». Реализация бесконечной цепочки характеризуется бесконечным спектром частот, регистрируемых в системе, а осуществление ограниченной цепочки – свойственно образованию уединенных волн и возникновению волновых ансамблей.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Термодинамическая концепция неравновесности позволила показать, что синергетические системы образуют новый класс объектов, которые возникают в областях нелинейного поведения или неравновесности. Их отклик на внешнее воздействие формируется в следующей последовательности: неравновесность – производство энтропии – поиск устойчивого состояния

– самоорганизация – переструктурирование – снижение уровня неравновесности – уменьшение производства энтропии – объект с новыми количественными и качественными признаками. Такая цепочка событий реализуется только в системах с положительной обратной связью при достижении управляющими параметрами пороговых значений (точка бифуркации (ветвления)), что приводит к когерентной реакции компонентов системы на изменившиеся внешние условия. Переход через точку бифуркации сопровождается появлением сложных автоколебательных движений и спектра периодических новообразований. Из возникших структурных единиц производится отбор наиболее стабильных объединений частиц (кластеров), которые затем клонируются по всей системе с использованием скейлинговых (масштабных) преобразований.

Для теоретического описания явлений и процессов в синергетической системе были предложены модели, опирающиеся на построения Онзагера, Пригожина, Олемского, Цаллиса и др. Однако оставался неисследованным вопрос об описании неравновесности на основе отклонений установленных термодинамических соотношений от их классических формулировок (термодинамическая концепция неравновесности). Предложенный подход позволяет сохранить все достижения равновесной термодинамики и расширить феноменологический метод на неравновесные объекты.

В представленном цикле работ применение преобразования Лежандра к неравновесной энтропии позволило ввести понятие функции неравновесности. Эта функция зависит от потенциалов термодинамических полей и определяет отклонение выражения для энтропии от ее классического вида. При стремлении системы к равновесию функция неравновесности и ее дифференциал обращаются в нуль, а формула для равновесной энтропии и уравнение Дюгема–Гиббса приобретают ранее установленный вид. Вблизи точки термодинамического равновесия фун-

кция неравновесности линейным образом зависит от потенциала теплового поля, что указывает на теплообменный характер неравновесного состояния при подходе системы к термодинамическому равновесию.

Физико-математический подход позволил установить существование ряда моделей компенсации неравновесности. В частности, в модели перекрестной компенсации асимметричного типа показано, что производство энтропии дает возможность снизить уровень неравновесности, которая, в свою очередь, подавляет рост производства энтропии в расширенном пространстве. Следовательно, хаотизация в синергетической системе подавляется возникновением упорядоченных структур. В рамках предложенной концепции были получены следующие результаты: в конкретных примерах, в частности, установлена нетождественность понятия «неравновесность» с такими понятиями, как «открытость системы» и «необратимость процессов»; проведена классификация состояний неравновесной системы; получены кинетические уравнения эволюции потенциалов термодинамических полей в термодинамическом фазовом пространстве; продемонстрирована возможность появления динамических эффектов и нового инварианта движения, который определяется суммой энтропии и функции неравновесности; найдены функциональные зависимости интенсивных потенциалов термодинамических полей от их экстенсивных аргументов, что позволило смоделировать для конкретных примеров различные отклики синергетической системы на внешнее воздействие. Полученные результаты указывают на перспективность данного направления исследований в области построения теории синергетических систем.

1. С.В.Терехов, В.Н. Варюхин, Т.Н. Мельник, А.Г. Петренко, В.М. Юрченко, ФТВД **27**, № 2, (2017).
2. С.В.Терехов, В.Н. Варюхин, Т.Н. Мельник, В.М. Юрченко, ФТВД **27**, № 1, 103 (2017).
3. А.Н. Игнатов, Оптоэлектроника и нанофотоника, Лань, Санкт-Петербург, (2011).
4. В.В. Погосов, Е.В. Васютин, В.П. Курбацкий и др., Наносистемы, наноматериалы, нанотехнологии **5**, 39 (2007).
5. С.В. Терехов, ФТВД **22**, № 1, 33 (2012).
6. Ш.М. Коган, УФН **145**, 285 (1985).
7. С.В. Терехов, Фракталы и физика подобия, Цифровая типография, Донецк (2011).
8. Ж.-П. Пуарье, Ползучесть кристаллов. Механизмы деформации металлов, керамик и минералов при высоких температурах, Мир, Москва (1988).
9. В.В. Селиванов, Механика разрушения деформируемого тела, МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва (1999).
10. С.В. Терехов, В.Н. Саяпин, ФТВД **24**, № 3-4, 39 (2014).
11. А. Надаи, Пластичность и разрушения твердых тел, Иностранная литература, Москва (1954).
12. Я.Б. Фридман, Механические свойства металлов. Ч.1. Деформация и разрушение, Машиностроение, Москва (1974).
13. Ю.М. Лахтин, В.П. Леонтьева, Материаловедение, Машиностроение, Москва (1980).
14. А. А. Ильюшин, В.С. Ленский, Сопротивление материалов, Гос. изд-во физ.-мат. лит., Москва (1959).
15. Ф.М. Морс, Г. Фешбах, Методы теоретической физики, Т.1, Иностранная литература, Москва (1958).
16. L. Onsager, Phys. Rev. **37**, 405; **38**, 2265 (1931).

*Terekhov S.V., Varyouhin V.N., Melnik T.N., Petrenko A.G.,
Yurchenko V.M.*

THERMODYNAMIC CONCEPT OF NON-EQUILIBRIUM. III. REACTIONS OF THE SYSTEM. ORIGIN OF HIERARCHIES

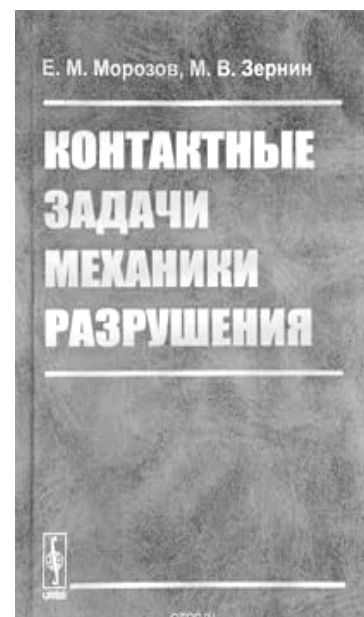
It is shown that different responses of the non-equilibrium system on external influence it is possible to model by means of potentials of the thermodynamics fields. Comparison of experimental and theoretical diagrams is conducted tension-deformation for metals and plastics. The chart of origin of endless and eventual hierarchy of irreversible processes is offered.

Keywords: thermodynamics system, non-equilibrium, self-organization, entropy, irreversible processes

Fig. 1. Response diagrams of a non-equilibrium system to external influence in the form of resonances (*a*), fractal steps (*b*) and noise (*b*)

Fig. 2. Theoretical stress σ –effective elongation ξ diagrams in aluminum (curve 1) and steel 18X2H4MA (curve 2)

Fig. 3. Theoretical stress σ –strain ξ diagrams: *a* – in polystyrene (curve 1) and high-impact polystyrene (curve 2); *b* – in pyraline: 1 – 0.007, 2 – 0, 3 – 0.042 [14, p. 86]



49. Физика и техника высоких давлений.

Донецк, 2018, т. 28, № 1, с. 54-61

PACS: 61.43.Dq; 64.70.pe; 81.10.Aj

Терехов С.В.

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ РАЗМЫТОГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА В МЕТАЛЛИЧЕСКОМ СТЕКЛЕ $Fe_{40}Ni_{40}P_{14}B_6$

Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина

Статья поступила в редакцию 16 января 2018 года

Рассмотрена простейшая термодинамическая модель локально-равновесной области неравновесной системы (метгласс $Fe_{40}Ni_{40}P_{14}B_6$). Аморфный сплав представлен в виде двух сосуществующих конденсированных фаз с пренебрежимо малым свободным объемом по сравнению с объемом самой системы, что позволяет не учитывать его при построении модели. Исследованы температурные и временные изменения объемной доли кристаллической фазы в сплаве $Fe_{40}Ni_{40}P_{14}B_6$. Показано, что в случае температурного изменения объемной доли кристаллической фазы параметры модели зависят от скоростей нагрева аморфного сплава. Продемонстрирована адекватность теоретических представлений экспериментальным данным для «изотермической» кристаллизации металлического стекла $Fe_{40}Ni_{40}P_{14}B_6$.

Ключевые слова: энергия Гиббса, химический потенциал, температура, время, параметр порядка, объемная доля, фаза, металлическое стекло

1. ВВЕДЕНИЕ

Теоретические представления о зарождении, росте кристаллов и кинетике процессов в стеклах были развиты в середине XX века [1,2]. Одной из актуальных задач термодинамики аморфных материалов является определение температурно-временных границ существования систем в метастабильном состоянии [3,4]. В этой связи возникает необходимость развития тео-

рии размытых фазовых переходов (см., напр., [5,6]) и разработки термодинамической модели металлических стекол. Целью работы является создание теоретического построения, адекватно описывающего температурные и временные зависимости экспериментальных величин в метглассе $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$.

Термодинамические методы позволяют исследовать предельные состояния различных гетерофазных систем. При моделировании неравновесных систем часто используют приближение локально-равновесных областей (напр., [7,8]). В них справедливы все термодинамические соотношения, но характеристические функции зависят от места расположения области и времени t .

2. ТЕМПЕРАТУРНО-ВРЕМЕННЫЕ ЗАВИСИМОСТИ ОБЪЕМНОЙ ДОЛИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ ФАЗЫ

Рассмотрим локально-равновесную двухфазную область, содержащую кристаллическую фазу (фаза 1) и аморфную матрицу (фаза 2). Отметим, что спонтанное зарождение и рост кристаллитов критического размера в аморфной матрице подробно изложено в работах [3,4]. Установим зависимость объемной доли кристаллической фазы от температуры T и времени t . Если фаза 1 занимает объем V_1 , а фаза 2 – V_2 , то объем системы V равен

$$V_1 + V_2 = V. \quad (1)$$

Разделив равенство (1) на объем V , получим соотношение

$$x_1 + x_2 = 1, \quad (2)$$

где $x_i = V_i/V$ – объемная доля фазы $i=1,2$.

Введем в рассмотрение параметр порядка η по формуле

$$\eta = x_1 - x_2. \quad (3)$$

Из (2) и (3) следует, что

$$x_1 = 0,5(1 + \eta), \quad x_2 = 0,5(1 - \eta). \quad (4)$$

При нагреве аморфного материала происходит рост кристалли-

тов по всему объему, при этом объемная доля фазы 1 изменяется в пределах от 0 до 1, что соответствует заполнению всего объема системы. В связи с этим из первой формулы (4) следует, что параметр порядка η принимает значения из интервала от -1 до $+1$.

Энергия Гиббса из расчета на единицу объема двухфазной системы равна

$$g = \mu_1 x_1 + \mu_2 x_2, \quad (5)$$

где μ_i – химические потенциалы невзаимодействующих между собой фаз (отсутствие взаимного влияния фаз друг на друга (напр., в приближении теории среднего поля) приводит к тому, что коэффициенты активности фаз равны 1) задаются формулами

$$\mu_i(P, T, t) = \mu_{i0}(P, T, t) + k_B T \ln x_i(T, t), \quad (6)$$

$\mu_{i0}(P, T, t)$ – стандартные значения химических потенциалов для каждой из фаз, P – давление, k_B – постоянная Больцмана. Подстановка (6) в (5) приводит к следующим выражениям для энергии Гиббса

$$g = \mu_{10} x_1 + \mu_{20} x_2 + k_B T (x_1 \ln x_1 + x_2 \ln x_2) = h - sT, \quad (7)$$

энтальпии Камерлинг-Оннеса $h = \mu_{10} x_1 + \mu_{20} x_2$ и конфигурационной энтропии Больцмана $s = -k_B (x_1 \ln x_1 + x_2 \ln x_2)$.

Замена в первом равенстве (7) значений объемных долей фаз x_i через параметр порядка η по равенствам (4) приводит к энергии Гиббса вида

$$g = g_0 + \frac{1}{2} \{g_1 \eta + k_B T [(1 + \eta) \ln(1 + \eta) + (1 - \eta) \ln(1 - \eta)]\}, \quad (8)$$

здесь параметры $g_0 = 0.5(\mu_{10} + \mu_{20} - 2k_B T \ln 2)$, $g_1 = \mu_{10} - \mu_{20}$.

Найдем экстремум энергии Гиббса (8) по аргументу η , которому отвечает локально-равновесное значение параметра порядка

$$\left. \left(\frac{dg}{d\eta} \right) \right|_{\eta=\eta_0} = 0 \Rightarrow g_1 + k_B T \ln \left(\frac{1+\eta_0}{1-\eta_0} \right) = 0 \Rightarrow \eta_0(T, t) = -\text{th} \left(\frac{g_1(T, t)}{2k_B T} \right). \quad (9)$$

Следовательно, равновесная доля кристаллической фазы равна

$$x_1(T, t) = \frac{1}{2} \left[1 - \text{th} \left(\frac{g_1(T, t)}{2k_B T} \right) \right], \quad (10)$$

а скорость изменения по температуре –

$$v_1(T, t) = \frac{dx_1}{dT} = \frac{x_1(1-x_1)}{k_B T^2} \left(g_1 - T \frac{dg_1}{dT} \right). \quad (11)$$

При протекании фазового перехода в неравновесной среде параметр $g_1/(2k_B) = f(T, t)$ запишем в виде ряда Тейлора с ограничением линейными членами

$$f(T, t) = f(T_x, t_x) + \frac{\partial f(T_x, t_x)}{\partial T} (T - T_x) + \frac{\partial f(T_x, t_x)}{\partial t} (t - t_x), \quad (12)$$

где T_x и t_x – температура и время, при которых на соответствующих кривых, описывающих объемную долю кристаллической фазы $x_1(T, t)$, имеется точка перегиба. При этих значениях указанных величин соответствующие скорости изменения функции $x_1(T, t)$ по температуре и времени имеют максимумы.

Так как при фиксированном давлении разность стандартных значений химических потенциалов фаз связана с теплотой фазового перехода и его температурой, то разложение (12) представляет собой линейный закон изменения теплоты фазового перехода первого рода от температуры и времени. Это приводит к тому, что фазовый переход первого рода происходит в определенных температурных и временных диапазонах, что позволяет говорить о его размытости. Наличие таких диапазонов, по-видимому, связано с устойчивостью системы по отношению к бесконечно малым или конечным флуктуациям плотности частиц вблизи зародышей кристаллической фазы, приводящих к изменению их размеров.

В силу того, что металлическое стекло представляет собой замороженное метастабильное состояние сплава, то это состо-

яние ограничено границами абсолютной и относительной устойчивости по отношению к внешним изменениям. Поэтому наличие температурного гистерезиса можно объяснить следующим образом. При достижении температуры стеклования (за счет высокой скорости охлаждения) аморфная матрица переходит из жидкого состояния в твердое, когда система подходит к границе абсолютной неустойчивости. Обратный переход (при нагреве металлического стекла) наблюдается при более высокой температуре, так как требуется время для прогрева материала и достижения системой границы относительной устойчивости.

Предложенная простейшая термодинамическая модель и ее проверка на массиве экспериментальных данных по металлическому стеклу $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$ (см. ниже), позволяет утверждать, что формулы (10)-(12) являются предельными соотношениями, к которым должны стремиться решения кинетических уравнений.

Для сравнения экспериментальных данных с формулами (10)-(12) представим аргумент $g_1/(2k_B T) = f(T, t)/T$ в виде

$$\frac{g_1}{2k_B T} = a \cdot \left(\frac{T_x}{T} - 1 \right) + b \cdot \frac{T_x t_x}{T} \cdot \left(\frac{t}{t_x} - 1 \right) + c \cdot \frac{T_x}{T}, \quad (13)$$

где $a = -\frac{\partial f(T_x, t_x)}{\partial T}$; $b \cdot T_x = \frac{\partial f(T_x, t_x)}{\partial t}$; $c \cdot T_x = f(T_x, t_x)$.

Рассмотрим 2 случая:

Тип 1: $a = a(q)$; $b = 0$; $c = 0$ (q – скорость нагрева с единицей измерения K / min). Сравнение теоретических расчетов с экспериментальными данными показывает, что температура

$$T_x(q) = (641.72 \pm 2) + 28.8 \log(q), \quad (14)$$

а параметр (табл. 1)

$$a(q) = 286.584 - 80.64 \log(q) \quad (15)$$

Таблица 1.

q	5	10	20	40	80	120	160	200
a	231.219	206.944	182.669	158.394	134.119	119.919	109.844	102.029

На рис. 1,*a* приведены расчетные кривые для объемной доли кристаллической фазы при разных скоростях нагрева аморфного материала, а на рис. 1,*б* – ее температурная скорость изменения. На рис. 2 приведено сравнение теоретических и экспериментальных кривых для металлического стекла $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{V}_6$ при скорости нагрева $q=120$ K/min.

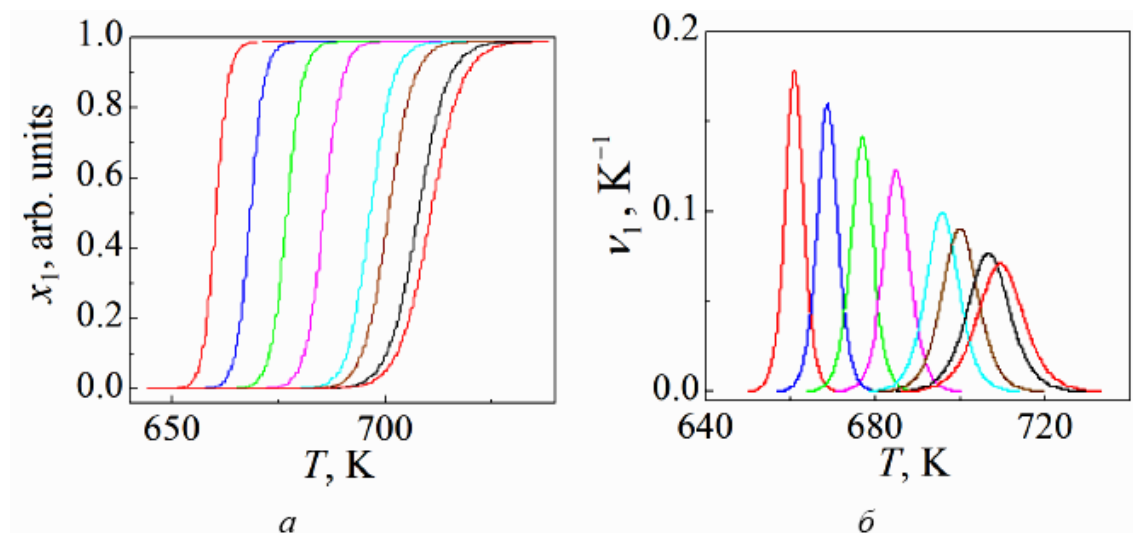


Рис. 1. Зависимость объемной доли кристаллической фазы (*a*) и скорости ее изменения (*б*) от температуры при различных скоростях нагрева q , K/min: значения соответствуют кривым (слева направо) – 5, 10, 20, 40, 80, 120, 160, 200

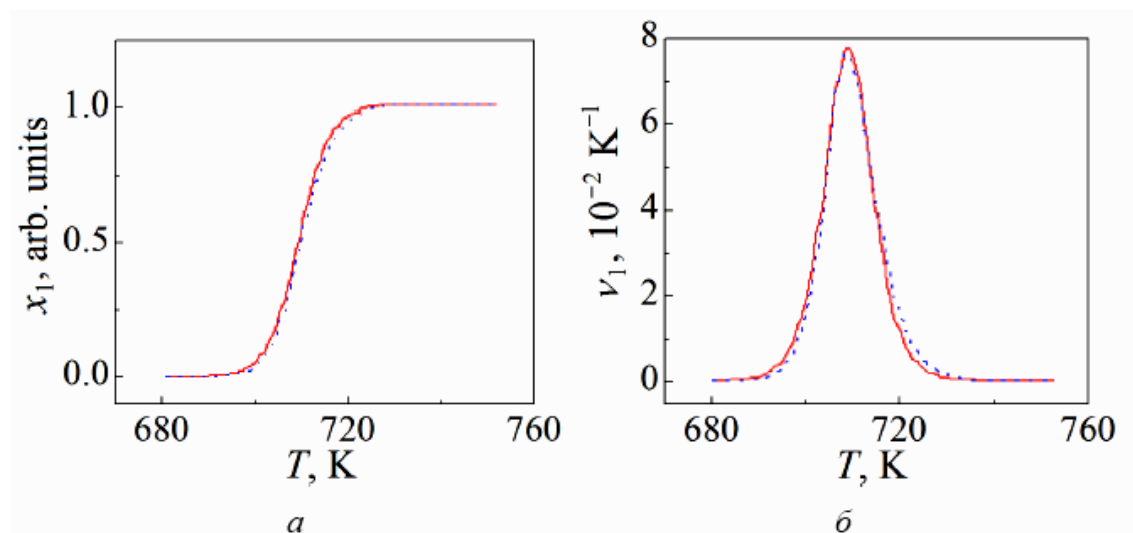


Рис. 2. Температурные зависимости объемной доли кристаллической фазы в металлическом стекле $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{V}_6$ (*a*) и скорости ее изменения (*б*) при $q = 120$ K/min: сплошные линии – теория, штриховые – эксперимент

Тун 2: $a = 0$; $b \neq 0$; $c = 0$. При «изотермической» кристаллизации фазовый переход происходит по истечению определенно-

го промежутка времени. Сравнение теоретических расчетов с экспериментальными данными показано на рис. 3 (параметр $b_1 = b \cdot \frac{T_x t_x}{T_0} = -3,1$, T_0 – температура выдержки при «изотермической» кристаллизации, время $t_x = 96$ s).

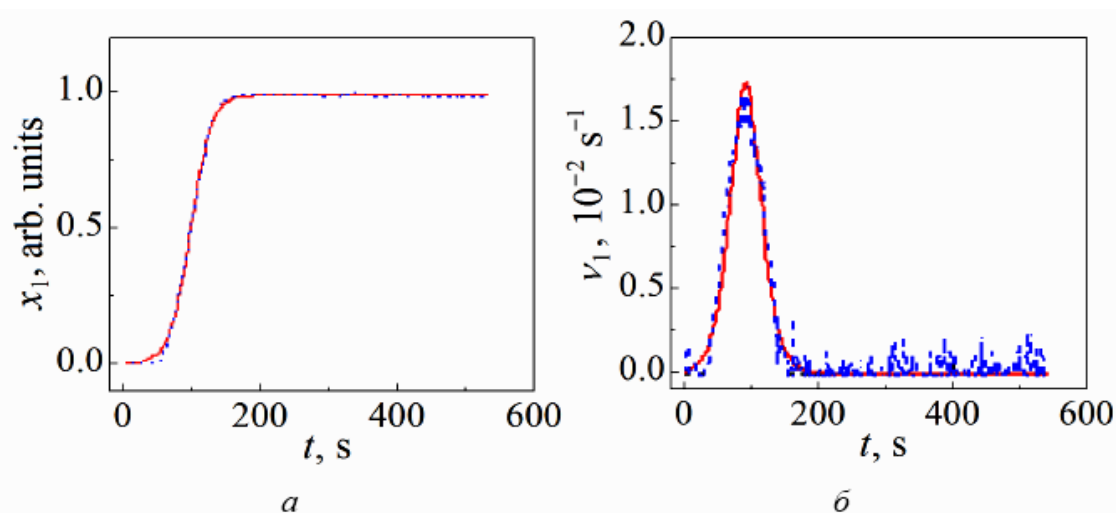


Рис. 3. Сравнение экспериментальных (штриховые линии) и теоретических (сплошные) зависимостей объемной доли кристаллической фазы (а) и скорости ее изменения (б) от времени в металлическом стекле $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$ при $T = 662$ К

Из рис. 2 и 3 видно, что модель адекватно описывает температурно-временные зависимости объемной доли кристаллической фазы, т.е. является математическим отображением тех процессов, которые протекают в аморфном материале. На рис. 4 приведены теоретические кривые, которые совпадают с экспериментальными данными при различных температурах выдержки материала.

Таблица 2.

T_0, K	t_x, s	b_1
617	14500	-5.06
619	10100	-5.0
622	7600	-4.9
633	1700	-4.35
649	360	-3.66
662	96	-3.1

Из рис. 4 видно, что с ростом температуры выдержки материала время кристаллизации уменьшается. Параметры модели приведены в табл. 2. Параметр b_1 связан с температурой выдержки T_0 соотношением

$$b_1 = 0.0431 \cdot T_0 - 31.64. \quad (16)$$

Проведенное теоретическое исследование металлического стекла $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$ позволило получить целый ряд соотноше-

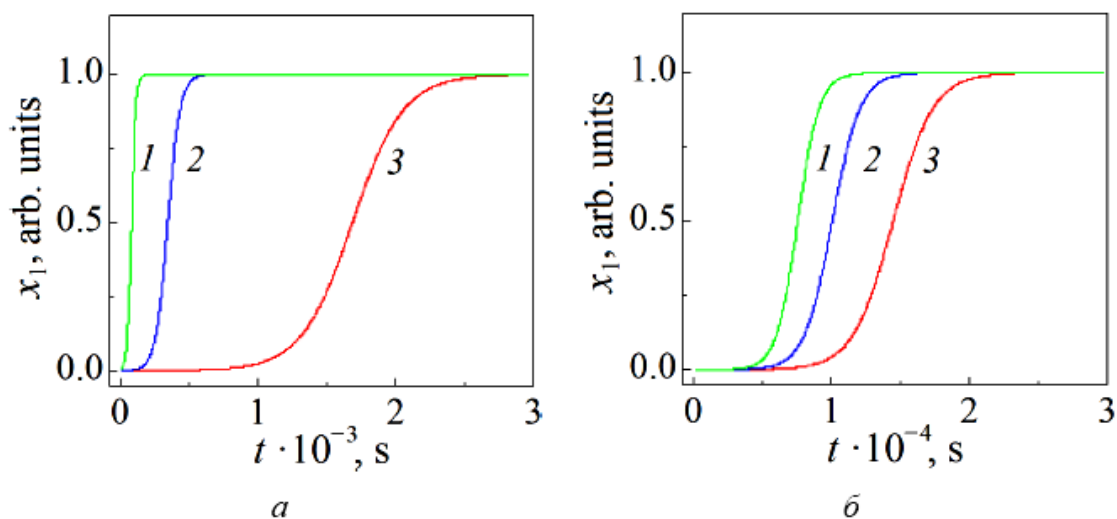


Рис. 4. Кристаллизационные кривые при различных температурах выдержки материала T , К: *а*: 1 – 662, 2 – 649, 3 – 633; *б*: 1– 622, 2 – 619, 3 – 617

ний, полезных для прогнозирования поведения аморфного сплава в зависимости от скорости нагрева материала и температуры выдержки при «изотермической» кристаллизации. Представленная термодинамическая модель, несмотря на феноменологический характер параметров модели *a*, *b* и *c*, может использоваться наряду с классическими моделями Колмогорова [9], Джонсона и Мэла [10] и Авраами [11] (модель КДМА).

3. ВЫВОДЫ

1. Предложенная термодинамическая модель качественно и количественно верно описывает экспериментальные массивы данных по кристаллизации в метглассе $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$ как при изменении температуры, так и времени.
2. Установлены линейные зависимости параметров модели от характеристик, которые определяют процесс кристаллизации.
3. Теоретические расчеты подтверждают выводы работ [1,2], в которых установлено линейное возрастание ширины фазового перехода в сплаве $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$ при увеличении скорости нагрева от 5 до 200 К/мин или с понижением температуры выдержки аморфного сплава при «изотермической» кристаллизации.

Автор искренне признателен В.И. Ткачу за представленные экспериментальные данные по аморфному сплаву $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$.

1. Дж. Кристиан, Теория превращений в металлах и сплавах, Мир, Москва (1978).
2. В.П. Скрипов, В.П. Коверда, Спонтанная кристаллизация переохлажденных жидкостей, Наука, Москва (1984).
3. О.В. Коваленко, С.Г. Рассолов, ФТВД **28**, 1, 76 (2018) .
4. S.V. Vasiliev, V.I. Tkatch, A.S. Aronin, O.V. Kovalenko, S.G. Rassolov, J. of Alloys and Compounds (2018), doi: 10.1016/j.jallcom.2018.02.059.
5. Б.Н. Ролов, В.Э. Юркевич, Физика размытых фазовых переходов. – Ростов-на-Дону: РГУ, 1983. – 320 с.
6. С.А. Алиев, Размытие фазовых переходов в полупроводниках и высокотемпературных сверхпроводниках. – Баку: Элм, 2007. – 286 с.
7. П.Е. Львов, В.В. Светухин, ФТТ 59, вып. 2, 345 (2017).
8. П.Е. Львов, В.В. Светухин, ФТТ 59, вып. 12, 2425 (2017).
9. А.Н. Колмогоров, Изв. АН СССР. Сер. матем. № 3, 355 (1937).
10. W.A. Johnson, R.E. Mehl, Trans. Amer. Inst. Min. Met. 135, 416 (1939).
11. M. Avrami, J. Chem. Phys. 7, 1103 (1939).

Terekhov S.V.

THERMODYNAMICS MODEL OF THE WASHED OUT PHASE TRANSITION IS IN METALLIC GLASS OF $Fe_{40}Ni_{40}P_{14}B_6$

Thermodynamics of local-equilibrium area of the non-equilibrium system is considered and the temperature and temporal changes of by volume stake of crystalline phase are investigational in amorphous material of $Fe_{40}Ni_{40}P_{14}B_6$. The system is presented as two co-existing condensed phases with ignored a small free volume. In particular, it is shown that in case of temperature change of by volume stake of crystalline phase model parameters depend on speeds of heating of amorphous alloy. Adequacy of theoretical presentations to experimental data is shown for metallic glass of $Fe_{40}Ni_{40}P_{14}B_6$.

Keywords: energy of Gibbs, chemical potential, temperature, time, parameter of order, by volume stake, phase, metallic glass

Fig. 1. Dependence of by volume stake of crystalline phase (*a*) and speed of her change (*b*) on a temperature at different speeds of heating of q : (from left to right) 5, 10, 20, 40, 80, 120, 160, 200 K/min

Fig. 2. Temperature dependences of by volume stake of crystalline phase in metallic glass of $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$ (*a*) and speeds of her change from a temperature (*b*) at $q=120$ K/min (dot-dash lines are a experiment; continuous lines are a theory)

Fig. 3. Comparison of experimental (dot-dash lines) and theoretical (continuous lines) dependences of by volume stake of crystalline phase (*a*) and speed of her change from time (*b*) in metallic glass of $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$ at $T=662$ K

Fig. 4. Crystallizational curves at the different temperatures of self-control of material (*a*: 1 – 662 K, 2 – 649 K, 3 – 633 K; *b*: 1 – 622 K, 2 – 619 K, 3 – 617 K)



50. Физика и техника высоких давлений.

Донецк, 2018, т. 28, № 3, с. 65-74

PACS: 61.43.Dq; 64.70.pe; 81.10.Aj

Терехов С.В., Лимановский А.И.

«ФАЗА ПУСТОТЫ» И РАЗМЫТЫЙ ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД

Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина

Статья поступила в редакцию 23 апреля 2018 года

Показана связь ранее предложенной простейшей термодинамической модели кристаллизации в метглассе $Fe_{40}Ni_{40}P_{14}B_6$ с моделью КДМА. Изучено влияние «фазы пустоты» на температурные и временные зависимости объемных долей фаз в аморфном материале. Установлено, что равновесность этой подсистемы противоречит экспериментальным данным, а ее неравновесность, наоборот, приводит к адекватному совпадению между модельными представлениями и натурными результатами.

Ключевые слова: модель, энергия Гиббса, химический потенциал, объемная доля, металлическое стекло, параметр порядка, «фаза пустоты»

ВВЕДЕНИЕ

Процессы кристаллизации [1,2] и фазовых превращений в конденсированных средах [3-7] характеризуются рядом общих закономерностей, связанных с появлением температурных и временных интервалов изменения некоторых характеристик (размытый фазовый переход) вблизи точки перехода. Эти явления описываются кинетическим уравнением Колмогорова [8-10] (модель КДМА). Экспериментальные исследования кристаллизации металлического стекла $Fe_{40}Ni_{40}P_{14}B_6$ [11,12] показали, что при возрастании скорости нагрева материала до величин более 100 К/мин, наблюдается отклонение кинетической кривой от теоретического графика по модели КДМА.

В этой связи в работе [13] была предложена термодинамическая модель, базирующаяся на использовании локального равновесия выделенной области. В этом случае справедливы все соотношения классической термодинамики, но характеристические функции зависят от места расположения области и времени t . Если при экспериментальном исследовании определяющих характеристик a_i материала они переносятся частями с объемами ω_i и существенно изменяются на расстояниях $L_i \propto a_i/|\nabla a_i|$, то характерный размер локально-равновесной области l удовлетворяет неравенствам: $\max \sqrt[3]{\omega_i} \ll l \ll \min L_i$. Если обозначить через t_1 время протекания релаксационных процессов, а через t_2 – время перехода всей системы в равновесие, то время установления термодинамического равновесия в локальной области t_e ограничено выполнением неравенств: $t_1 \ll t_e \ll t_2$. Отметим, что для конденсированных фаз время $t_1 \sim 10^{-8}$ с, а время t_2 может исчисляться достаточно большими промежутками времени. Следовательно, равновесным областям можно поставить в соответствие локальные значения как экстенсивных, так и интенсивных переменных, а также использовать все соотношения классической термодинамики. Такой подход позволил получить явную зависимость объемной доли кристаллической фазы от температуры и времени [13]. Теоретические кинетические кривые адекватно описывают массив экспериментальных данных [11,12] при любых значениях скорости нагрева аморфного материала.

Однако невыясненным остался вопрос о влиянии «свободного» объема на кинетику процессов в металлическом стекле $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$. Поэтому целью работы является не только выяснение роли пустого пространства внутри металлического стекла на термодинамику вещества, получение температурной зависимости объемных долей сосуществующих фаз, но и установление соответствия между феноменологическими параметрами модели [13] и кинетическими величинами теории КДМА.

2. СВЯЗЬ МОДЕЛИ ИДЕАЛЬНЫХ ФАЗ С ТЕОРЕТИЧЕСКИМ ПОСТРОЕНИЕМ КДМА

В приближении идеальных фаз [13] объемная доля кристаллитов $x_1(T, t)$ в аморфной матрице описывается формулой

$$x_1(T, t) = \frac{1}{2} \left[1 - \operatorname{th} \left(\frac{g_1(T, t)}{2k_B T} \right) \right], \quad (1)$$

где T – температура, t – время, $g_1(T, t) = \mu_{10} - \mu_{20}$, $\mu_{\sigma 0}$ – стандартное значение химического потенциала фазы σ (кристаллиты – фаза 1, аморфная матрица – фаза 2), k_B – постоянная Больцмана.

В работе [13] величина

$$\alpha = \frac{g_1(T, t)}{2k_B T} = \frac{f(T, t)}{T} = a \left(\frac{T_x}{T} - 1 \right) + b \frac{T_x t_x}{T} \left(\frac{t}{t_x} - 1 \right) + c \frac{T_x}{T}, \quad (2)$$

где $a = -\partial f(T_x, t_x) / \partial T$; $b T_x = \partial f(T_x, t_x) / \partial t$; $c T_x = f(T_x, t_x)$; T_x и t_x – соответственно температура и время, при которых на графиках функции (1), наблюдаются точки перегиба.

Выясним условия, при которых (1) переходит в формулу модели КДМА, для чего преобразуем (1) к виду

$$x_1 = \frac{1}{2} [1 - \operatorname{th} \alpha] = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{\operatorname{sh} \alpha}{\operatorname{ch} \alpha} \right] = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{e^\alpha - e^{-\alpha}}{e^\alpha + e^{-\alpha}} \right] = \frac{1}{2} \frac{2e^{-\alpha}}{e^\alpha + e^{-\alpha}} = \frac{1}{1 + e^{2\alpha}}, \quad (3)$$

При выполнении сильного неравенства $e^{2\alpha} \ll 1$ воспользуемся разложением в ряд Маклорена функции $\frac{1}{1+x} \approx 1 - x$ [14, с.678] с ограничением ряда линейным членом. Тогда функция x_1 принимает вид

$$x_1 = \frac{1}{1 + e^{2\alpha}} \approx 1 - \exp(2\alpha). \quad (4)$$

Сравнение (4) с равенством (4.11) [1, с.54] модели КДМА в формулировке Аврамы приводит к соотношению (показатель степени $3 \leq n \leq 4$)

$$2\alpha = -k(T, t)t^n, \quad (5)$$

т.е. функция $f(T, t)$ из (2) равна

$$f(T, t) = -\frac{1}{2}k(T, t)Tt^n. \quad (6)$$

Таким образом, феноменологические коэффициенты a , b и c в разложении (2) задаются формулами

$$a = -\left. \frac{\partial f(T, t)}{\partial T} \right|_{T=T_x; t=t_x} = -\left(1 + \left. \frac{\partial \ln k}{\partial \ln T} \right|_{T=T_x; t=t_x} \right) \frac{f(T_x, t_x)}{T_x}, \quad (7)$$

$$b = \frac{1}{T_x} \left. \frac{\partial f(T, t)}{\partial T} \right|_{T=T_x; t=t_x} = \left(n + \left. \frac{\partial \ln k}{\partial \ln T} \right|_{T=T_x; t=t_x} \right) \frac{f(T_x, t_x)}{T_x t_x}, \quad (8)$$

$$c = \frac{f(T_x, t_x)}{T_x} = -\frac{1}{2}k(T_x, t_x)t_x^n. \quad (9)$$

Тогда формулу (2) можно переписать в виде

$$\frac{g_1}{2k_B T} = c \cdot \left[\beta_1 \left(\frac{T_x}{T} - 1 \right) + \beta_2 \left(\frac{t}{t_x} - 1 \right) + \beta_3 \right], \quad (10)$$

здесь коэффициенты

$$\beta_1 = -\left(1 + \left. \frac{\partial \ln k}{\partial \ln T} \right|_{T=T_x; t=t_x} \right), \quad \beta_2 = \frac{T_x}{T} \left(n + \left. \frac{\partial \ln k}{\partial \ln t} \right|_{T=T_x; t=t_x} \right) \quad \text{и} \quad \beta_3 = \frac{T_x}{T}.$$

Из формулы (10) видно, что при стремлении кинетического коэффициента $k(T, t)$ к нулю в точке (T_x, t_x) , доля объема, в котором произошло фазовое превращение, по модели Авраами становится равным 1. В модели идеальных фаз [13] равновесный параметр порядка $\eta_0 = x_1 - x_2 = -\text{th} \left(\frac{g_1(T, t)}{2k_B T} \right)$ обращается в 0, что

соответствует равенству объемных долей кристаллической и аморфной фаз (формула (1)) $x_1 = x_2 = 0.5$. Это противоречие разрешимо тогда, когда коэффициент $k(T_x, t_x) \neq 0$, т.е. коэффициент $c \neq 0$. Отметим, что параметр β_1 обращается в нуль при выполнении равенства

$$\left. \frac{\partial \ln k}{\partial \ln T} \right|_{T=T_x; t=t_x} = -1, \quad \text{а параметр } \beta_2 \text{ – при}$$

$$\left. \frac{\partial \ln k}{\partial \ln t} \right|_{T=T_x; t=t_x} = -n.$$

Этим случаям отвечают различные типы кристаллизации:

Тип 1. $\beta_1 \neq 0$; $\beta_2 = 0$; $\beta_3 \neq 0$. Формула (10) приобретает вид

$$\frac{g_1}{2k_B T} = c\beta_1 \left(\frac{\beta_1 + 1}{\beta_1} \frac{T_x}{T} - 1 \right), \quad (11)$$

который при выполнении сильного неравенства

$$\beta_1 \gg 1 \Rightarrow \frac{\beta_1 + 1}{\beta_1} \approx 1$$

соответствует *Типу 1* из работы [13]. Следовательно, параметр a в этом случае равен $a = c\beta_1$.

Тип 2. $\beta_1 = 0$; $\beta_2 \neq 0$; $\beta_3 \neq 0$. Равенство (10) задается выражением

$$\frac{g_1}{2k_B T} = c(\beta_2 - \beta_3) \left(\frac{\beta_2}{\beta_2 - \beta_3} \frac{t}{t_x} - 1 \right), \quad (12)$$

Если справедливо неравенство

$$\beta_2 \gg \beta_3 \Rightarrow \frac{\beta_2}{\beta_2 - \beta_3} \approx 1 \text{ (или } n + \left. \frac{\partial \ln k}{\partial \ln T} \right|_{T=T_x; t=t_x} \gg 1),$$

то происходит «изотермическая» кристаллизация по *Типу 2* из работы [13], а параметр $b_1 = c\beta_2$.

Таким образом, сравнение результатов работ [13] и [1,10] позволяет связать параметры термодинамической модели с кинетическими коэффициентами, чтобы определять феноменологические параметры модели [13] по экспериментальным данным и прогнозировать температурные изменения объемных долей фаз.

Кроме того, в рамках модели [13] не выяснена роль «свободного» объема в сосуществовании локальных областей с различными фазовыми состояниями.

ВЛИЯНИЕ «ФАЗЫ ПУСТОТЫ» НА УПОРЯДОЧЕНИЕ АМОРФНОЙ МАТРИЦЫ

Пусть металлическое стекло $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$ состоит из локально-равновесных областей. Для них справедливы все формулы равновесной термодинамики, но обобщенные координаты и потенциалы, а также характеристические функции системы зависят от времени и пространственного аргумента. Кроме того,

каждая область представляет гомогенную часть объекта исследования, т.е. находится в строго определенном фазовом состоянии.

Особенностью любого аморфного материала является наличие в нем объема V_0 , свободного от частиц. Согласно [15], часть объема системы, которая занята небольшим числом корпускул того или иного вещества, будем называть «фазой пустоты». При дискретном подходе «свободный» объем образца заполняется квазичастицами, которые назовем «кавитонами» (от итальянского “cavità” – пустота, пустотность). Тогда любая среда будет плотно упакована атомами (молекулами) и кавитонами. Например, если объемная доля кавитонов и их число значительно меньше объемной доли и числа частиц, то среда находится в кристаллическом состоянии, при этом кавитон, который замещает частицу в узле кристаллической решетки, называют вакансией. Если объемная доля кавитонов невелика, но их число сопоставимо с числом корпускул, то локальная область принадлежит к аморфной матрице, или содержит «замороженную» жидкую фазу. В случае, когда объемная доля кавитонов и их число значительно превышают объемную долю и число атомов, то область находится в «замороженном» разреженном состоянии, или образует «фазу пустоты». Следовательно, локальная область аморфного материала находится в одном из 3 фазовых состояний: кристаллическом (кристаллиты – фаза 1); «замороженном» жидком (аморфная матрица – фаза 2); газовом («фаза пустоты» – фаза 3). Изменение объемных долей фаз происходит двумя способами. Первый способ связан с индивидуальным ростом соответствующих локальных областей. Вторым способом определяется синергетической реакцией локальных областей системы с одинаковым фазовым состоянием, приводящей к их слиянию (образуется зернисто-подобная структура) и вытеснению из объема системы «фазы пустоты».

Следует подчеркнуть, что равновесность локальных облас-

тей материала не обеспечивает автоматически равновесные значения характеристик элементов, образующих объект. Поэтому рассмотрим равновесную (химический потенциал кавитонов равен нулю, $\mu_0 = 0$) и неравновесную ($\mu_0 \neq 0$) «фазы пустоты».

1. *Равновесная «фаза пустоты».* Так как объемная доля кавитонов равна $x_0 = V_0 / V$ (V – объем системы), то объемные доли фаз связаны соотношением

$$x_1 + x_2 + x_0 = 1 \Rightarrow x_1 + x_2 = 1 - x_0 = v. \quad (13)$$

Для термодинамически равновесных кавитонов их химический потенциал равен нулю, т.е. выполняется равенство

$$\mu_0(P, T) = \mu_{00}(P, T) + k_B T \ln x_0(P, T) = 0, \quad (14)$$

где $\mu_{00}(P, T)$ – стандартное значение химического потенциала кавитонов при атмосферном давлении P и комнатной температуре T . Из второго равенства (14) находим, что объемная доля «фазы пустоты» равна

$$x_0(P, T) = \exp(-\beta \mu_{00}(P, T)), \quad (15)$$

здесь $\beta = (k_B T)^{-1}$. Формула (15) показывает, что при равновесии объемная доля кавитонов определяется давлением P и температурой T .

Вводя в рассмотрение параметр порядка

$$\eta = x_1 - x_2, \quad (15)$$

и учитывая последнее равенство (13), получим

$$x_1 = (v + \eta) / 2, \quad x_2 = (v - \eta) / 2. \quad (16)$$

Энергия Гиббса из расчета на единицу объема системы равна

$$\begin{aligned} g &= \mu_{10} x_1 + \mu_{20} x_2 + k_B T (x_1 \ln x_1 + x_2 \ln x_2) = \\ &= \frac{1}{2} \{g_0 v + g_1 \eta + k_B T [(v + \eta) \ln(v + \eta) + (v - \eta) \ln(v - \eta)]\}, \end{aligned} \quad (17)$$

где коэффициенты $g_0 = \mu_{10} + \mu_{20} - 2k_B T \ln 2$, $g_1 = \mu_{10} - \mu_{20}$.

Экстремум функции (23) найдем из системы равенств

$$\left. \frac{dg}{d\eta} \right|_{\eta=\eta_1} = 0 \Rightarrow g_1 + k_B T \ln \left(\frac{v + \eta_1}{v - \eta_1} \right) = 0, \quad (18)$$

Из (18) после несложных преобразований следует, что равновесное значение параметра порядка η_1 задается формулой подобия

$$\eta_1 = -v \operatorname{th}\left(\frac{g_1}{2k_B T}\right) = v \eta_0, \quad (19)$$

а равновесные доли фаз равны:

$$x_1 = \frac{v}{2} \left[1 - \operatorname{th}\left(\frac{g_1}{2k_B T}\right) \right], \quad x_2 = \frac{v}{2} \left[1 + \operatorname{th}\left(\frac{g_1}{2k_B T}\right) \right], \quad x_0 = 1 - v. \quad (20)$$

Следовательно, присутствие в аморфном материале равновесных кавитонов приводит к снижению объемной доли кристаллической фазы, что не соответствует экспериментальным данным. Поэтому перейдем к рассмотрению случая, когда кавитонная подсистема не находится в тепловом равновесии.

2. *Неравновесная подсистема кавитонов*, для которых химический потенциал (14) отличен от нуля. В этом случае помимо параметра порядка η , введенного по формуле (15), определим второй параметр порядка

$$\xi = x_1 - x_0. \quad (21)$$

Параметры η и ξ являются независимыми аргументами энергии Гиббса (17) с учетом энергетического вклада кавитонов.

Объемные доли фаз связаны с ними соотношениями

$$x_1 = (1 + \eta + \xi)/3, \quad x_2 = (1 - 2\eta + \xi)/3, \quad x_0 = (1 + \eta - 2\xi)/3, \quad (22)$$

а энергия Гиббса локальной области определяется формулой

$$\begin{aligned} g &= \mu_{10}x_1 + \mu_{20}x_2 + \mu_{00}x_0 + k_B T(x_1 \ln x_1 + x_2 \ln x_2 + x_0 \ln x_0) = \\ &= \frac{1}{3} \{g_0 + g_{11}\eta + g_{12}\xi + k_B T[(1 + \eta + \xi) \ln(1 + \eta + \xi) + \\ &+ (1 - 2\eta + \xi) \ln(1 - 2\eta + \xi) + (1 + \eta - 2\xi) \ln(1 + \eta - 2\xi)]\}, \end{aligned} \quad (23)$$

где коэффициенты

$$g_0 = \mu_{10} + \mu_{20} + \mu_{00} - 3k_B T \ln 3, \quad g_{11} = \mu_{10} - 2\mu_{20} + \mu_{00},$$

$$g_{12} = \mu_{10} + \mu_{20} - 2\mu_{00}.$$

Экстремумы функции (23) определяются системой уравнений

$$\frac{dg}{d\eta} = 0, \quad \frac{dg}{d\xi} = 0, \quad (24)$$

которая в явном виде представляет собой систему нелинейных алгебраических уравнений

$$\frac{(1+\eta+\xi)(1+\eta-2\xi)}{(1-2\eta+\xi)^2} = \lambda_1, \quad \frac{(1+\eta+\xi)(1-2\eta+\xi)}{(1+\eta-2\xi)^2} = \lambda_2, \quad (25)$$

здесь $\lambda_1 = \exp(-\beta g_{11})$, $\lambda_2 = \exp(-\beta g_{12})$, $\beta = (k_B T)^{-1}$. Разделив первое равенство (25) на второе и выполнив простые преобразования, получим

$$\xi = \psi_0 + \psi_1 \eta, \quad (26)$$

где $\psi_0 = \frac{1-\kappa}{2+\kappa}$, $\psi_1 = \frac{1+2\kappa}{2+\kappa}$, $\kappa = \sqrt[3]{\frac{\lambda_1}{\lambda_2}}$. Подстановка (26) в пер-

вое равенство (25) и приведение подобных членов приводит к квадратному уравнению

$$A\eta^2 + B\eta + C = 0, \quad (27)$$

здесь коэффициенты

$$A = \lambda_1(\psi_1 - 2)^2 + (\psi_1 + 1)(2\psi_1 - 1),$$

$$B = 2\lambda_1(\psi_0 + 1)(\psi_1 - 2) + (\psi_0 + 1)(2\psi_1 - 1) + (\psi_1 + 1)(2\psi_0 - 1),$$

$$C = \lambda_1(\psi_0 + 1)^2 + (\psi_0 + 1)(2\psi_0 - 1).$$

В зависимости от знака дискриминанта $D = B^2 - 4AC$ уравнение (27): 1) не имеет корней ($D < 0$); 2) имеет два совпадающих корня $\eta_{1,2} = -\frac{B}{2A}$ ($D = 0$); 3) имеет два различающихся кор-

ня

$$\eta_{1,2} = \frac{-B \mp \sqrt{D}}{2A} \quad (D > 0). \quad (28)$$

Первые два случая не описывают экспериментальное изменение объемной доли кристаллической фазы при любых значениях параметров. При $D > 0$ физический смысл имеет корень

$$\eta_1 = \frac{-B - \sqrt{D}}{2A},$$

так как второй корень приводит к значениям объемной доли фазы 1 вне интервала $[0; 1]$.

Представим параметры κ и λ_1 в виде

$$\kappa = \exp\left[a_1\left(\frac{T_{xx}}{T} - 1\right)\right], \quad (29)$$

$$\lambda_1 = \exp\left[a_2\left(\frac{T_{xx}}{T} - 1\right)\right], \quad (30)$$

где a_1 и a_2 определены из сравнения теоретических и экспериментальных кривых для металлического стекла $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$, полученного при скорости нагрева (рис. 1)

$$q = 80 \text{ K/min}; a_1 = 15.0; a_2 = -279.809; T_{xx} = 694.6.$$

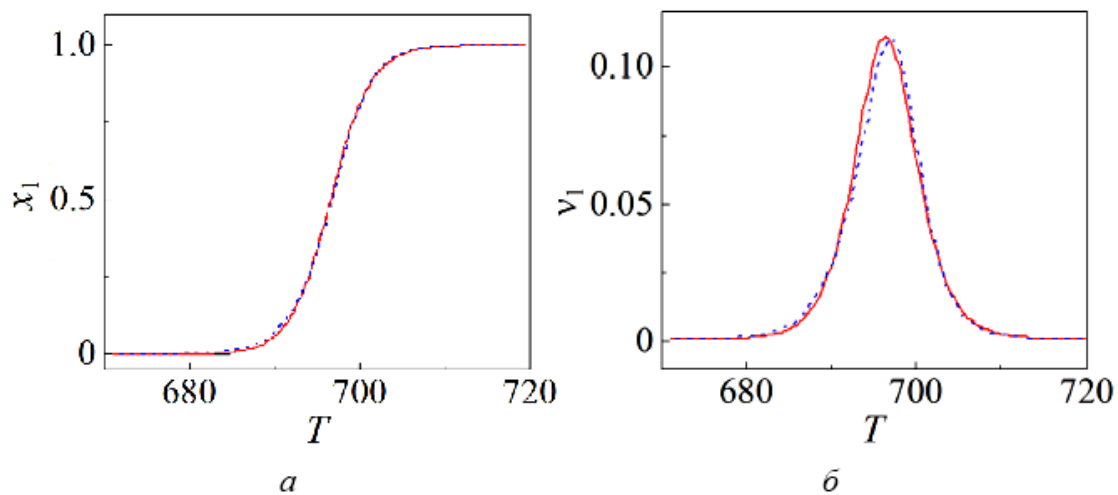


Рис. 1. Зависимость объемной доли фазы 1 (а) и скорости ее изменения (б) от температуры при скорости нагрева аморфного материала 80 К/мин: — – теория, – эксперимент

На рис. 2 показаны температурные зависимости объемных долей фаз, а на рис. 3 – графики параметров порядка $\eta_1(T)$ и $\xi_1(T)$ в металлическом стекле $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$.

Присутствие «фазы пустоты» в металлическом стекле существенно изменяет вид температурных зависимостей объемных долей фаз и скоростей их изменения. Кавитоны изменяют характеристики локальных областей материала как в окрестности термодинамического равновесия, так и вдали от него. Равновесная «фаза пустоты» не дает вклада в энергию Гиббса и снижает объемную долю закристаллизованного вещества, что противоречит экспериментальным данным.

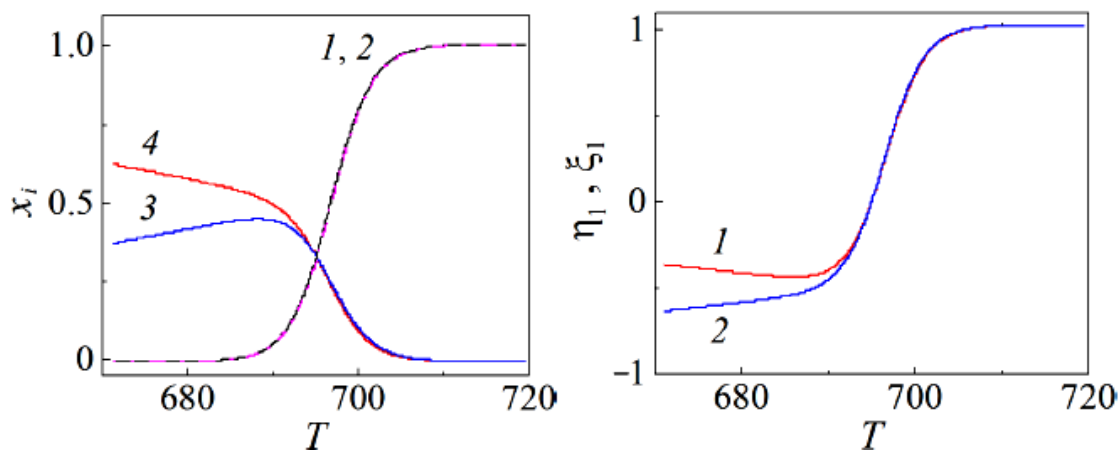


Рис. 2. Зависимости объемных долей фаз в металлическом стекле $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$ от температуры: 1 – x_1 по формуле (1); 2 – x_1 (22); 3 – x_2 (15); 4 – x_0 (21)

Рис. 3. Изменения параметров порядка η_1 (1) и ξ_1 (2) металлического стекла $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$ в зависимости от температуры

Неравновесность кавитонной подсистемы приводит к появлению в энергии Гиббса дополнительного слагаемого и оказывает влияние на процесс кристаллизации, что проявляется в снижении температуры, при которой наблюдается перегиб графика объемной доли фазы 1, а также в усложнении вида теоретических формул для расчета объемной доли кристаллитов и скорости ее изменения.

3. ВЫВОДЫ

1. Феноменологические параметры a , b и c ранее предложенной простейшей термодинамической модели [13] могут определяться по экспериментальным массивам данных о кинетике процесса кристаллизации в металлическом стекле $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$, что повышает прогностические возможности модели [13].
2. Установлено, что равновесная «фаза пустоты» понижает объемную долю кристаллической фазы, не внося вклада в энергию Гиббса, что противоречит экспериментальным результатам.
3. Показано, что учет наличия неравновесных кавитонов в аморфном материале $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$ приводит к дополнительному вкладу в энергию Гиббса, который вызывает: смещение температуры T_x , при которой наблюдается перегиб графика объемной

доли фазы 1; усложнение расчетных формул модели без увеличения точности вычислений и возрастание доли закристаллизовавшегося вещества при температуре T_x ($x_1(T_x)=0.513$).

Авторы искренне признательны д-ру ф.-м. н. В.И. Ткачу за представленные экспериментальные данные по аморфному сплаву $Fe_{40}Ni_{40}P_{14}B_6$.

1. Дж. Кристиан, Теория превращений в металлах и сплавах, Мир, Москва (1978).
2. В.П. Скрипов, В.П. Коверда, Спонтанная кристаллизация переохлажденных жидкостей, Наука, Москва (1984).
3. Б.Я. Любов, Кинетическая теория фазовых превращений, Металлургия, Москва (1969).
4. Б.Я. Любов, Диффузионные процессы в неоднородных твердых средах, Наука, Москва (1981).
5. Б.Я. Любов, Диффузионные изменения дефектной структуры твердых тел, Металлургия, Москва (1985).
6. М. Фольмер, Кинетика образования новой фазы, Наука, Москва (1986).
7. К.П. Гуров, Е.А. Смирнов, А.Н. Шабалин, Диффузия и кинетика фазовых превращений в металлах и сплавах, МИФИ, Москва (1990).
8. А.Н. Колмогоров, Изв. АН СССР. Сер. матем. № 3, 355 (1937).
9. W.A. Johnson, R.E. Mehl, Trans. Amer. Inst. Min. Met. 135, 416 (1939).
10. M. Avrami, J. Chem. Phys. 7, 1103 (1939).
11. О.В. Коваленко, С.Г. Рассолов, ФТВД **28**, 1, 76 (2018).
12. S.V. Vasiliev, V.I. Tkatch, A.S. Aronin, O.V. Kovalenko, S.G. Rassolov, J. of Alloys and Compounds (2018), doi: 10.1016/j.jallcom.2018.02.059.
13. С.В. Терехов, ФТВД **28**, 1, 54 (2018).
14. М.Я. Выгодский, Справочник по высшей математике, Астель. АСТ, Москва (2006).

15. В.И. Фистуль, В.И. Петровский, Н.С. Рытова, П.М. Гринштейн, Физика и техника полупроводников **13**, 7, 1402 (1979).

Terekhov S.V., Limanovsky A.I.

«PHASE OF EMPTINESS» AND WASHED OUT PHASE TRANSITION

A relation between the simplest thermodynamics model of crystallization in the $Fe_{40}Ni_{40}P_{14}B_6$ metal glase offered before and the Kolmogorov-Johnson-Mehl-Avrami (KJMA) model is shown. The effect of the «phase of emptiness» on temperature and time dependences of the volume fractions of phases in an amorphous material is studied. It is found that equilibrium of this subsystem conflicts with experimental data. Vice versa, non-equilibrium state results in an adequate coincidence between modeling and experimental data.

Keywords: model, Gibbs energy, chemical potential, volume fraction, metal glass, order parameter, «phase of emptiness»

Fig. 1. Temperature dependence of the volume fraction of phase 1 (*a*) and the rate of the change (*b*) at the amorphous material heating rate of 80 K/min (— — theory, ⋯ — experiment)

Fig. 2. Temperature dependence of the volume fraction of phases in the $Fe_{40}Ni_{40}P_{14}B_6$ metal glass: 1 — x_1 by formula (1); 2 — x_1 (22); 3 — x_2 (15); 4 — x_0 (21)

Fig. 3. Temperature dependence of the order parameters of the $Fe_{40}Ni_{40}P_{14}B_6$ metal glass η_1 (1) and ξ_1 (2)

51. Физика и техника высоких давлений.

Донецк, 2019, т. 29, № 2, с. 24-39

PACS: 61.43.Dq, 64.70.pe, 81.10.Aj

Терехов С.В.

**РАЗМЫТЫЙ ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД В АМОРФНОМ
СПЛАВЕ $Fe_{40}Ni_{40}P_{14}V_6$: ТЕРМОДИНАМИКА ФАЗ И
КИНЕТИКА КРИСТАЛЛИЗАЦИИ**

Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина

Статья поступила в редакцию 17 апреля 2019 года

По экспериментальным данным для объемной доли кристаллитов в аморфном сплаве $Fe_{40}Ni_{40}P_{14}V_6$ уточнены зависимости параметров ранее предложенной модели идеальных фаз от скорости нагрева q аморфного образца. Продemonстрировано хорошее согласие между теоретическими и экспериментальными температурными и временными зависимостями объемной доли кристаллической фазы. Предложена «диффузионная» модель процесса перехода в кристаллическое состояние. Показано, что рост сферического зародыша описывается кинетическим уравнением, решениями которого являются стационарная функция и функция с автомоделным аргументом. Установлено условие достижения температуры, при которой наблюдается максимум скорости фазового превращения.

Ключевые слова: объемная доля, кристаллическая фаза, параметр порядка, химический потенциал, энергия Гиббса, температура, металлическое стекло

1. ВВЕДЕНИЕ: МОДЕЛЬ ИДЕАЛЬНЫХ ФАЗ

В работе [1] была предложена термодинамическая модель аморфного сплава, содержащего две фазы, одна из которых состоит из локальных областей с упорядоченным расположе-

нием частиц (кристаллиты), а другая – из малых областей с хаотическим расположением атомов в пространстве (аморфная матрица). Предположение об отсутствии дальнего действия взаимного влияния областей друг на друга позволяет говорить об идеальных фазах (модель идеальных фаз). В работе [2] была исследована ситуация трехфазного состояния сплава, когда локальные области с отсутствием частиц были объединены в единую «фазу пустоты». Дискретизация объема «фазы пустоты» позволила ввести новые квазичастицы «кавитоны» (кавитонная модель: вакансия в кристаллической решетке является частным случаем кавитона). Было проведено исследование их поведения в случаях, когда «фаза пустоты» находится в термодинамическом равновесии или в неравновесном состоянии. Локально-равновесные кавитоны не влияют на энергию Гиббса аморфного сплава, а локально-неравновесные квазичастицы усложняют схему расчета без существенного повышения точности совпадения теоретических расчетов с экспериментальными данными [3] по объемной доле кристаллитов в металлическом стекле $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$. Также в работах [1, 2] была продемонстрирована адекватность теоретических представлений экспериментальным данным [3] по зависимостям объемной доли кристаллической фазы и скорости фазового превращения от температуры.

Отметим, что модель [1] приводит к более простым соотношениям, которые описывают температурные и временные зависимости объемных долей фаз и скоростей фазовых превращений для аморфного сплава $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$. Кроме того, предложенная в модели идеальных фаз логарифмическая аппроксимация зависимости параметров модели от скорости нагрева q образца приводит к повышению погрешности расчета при малых величинах q . В этой связи возникает необходимость уточнения этих зависимостей для лучшего согласия теоретических и экспериментальных значений указанных вы-

ше величин. Кроме того, требуется исследование экстремальных свойств полной энергии Гиббса аморфного материала, а также разности энергий Гиббса кристаллической и аморфной фаз, что важно для понимания процессов кристаллизации и упорядочения. Поэтому модель идеальных фаз применяется в данной работе для описания роста сферических зародышей кристаллической фазы с использованием теорий Онзагера [4], сродства [5], диссипативных структур [6], обобщенной решеточной модели [7] и модели Даркена-Гурри в изложении [8] (с. 314-316).

Целями данной работы являются: нахождение новой аппроксимации зависимости одного из параметров модели идеальных фаз от скорости нагрева аморфного образца; исследование экстремальных свойств энергии Гиббса для системы в целом и разности энергий Гиббса кристаллической и аморфной фаз; получение кинетического уравнения для параметра порядка и анализ его решений.

Согласно модели [1], невзаимодействующие между собой кристаллиты (фаза 1, которая занимает объем V_1) и аморфная матрица (фаза 2, заполняющая объем V_2) располагаются в объеме системы V . Объемные доли фаз вычисляются по формуле

$$x_i = V_i / V \quad (i=1,2) \quad (1)$$

и удовлетворяют равенству

$$x_1 + x_2 = 1. \quad (2)$$

Определим параметр порядка η как разность объемных долей фаз 1 и 2

$$\eta = x_1 - x_2. \quad (3)$$

Выразим их через величину η с учетом равенства (2):

$$x_1 = \frac{1+\eta}{2}, \quad x_2 = \frac{1-\eta}{2}. \quad (4)$$

Так как объемные доли фаз изменяются в пределах от 0 до 1, то параметр порядка η принимает значения из интервала от -1 ($x_1 = 0, x_2 = 1$) до $+1$ ($x_1 = 1, x_2 = 0$).

Химические потенциалы идеальных фаз (коэффициенты активности фаз равны 1) при внешних значениях давления P и температуры T в момент времени t равны

$$\mu_i(P, T, t) = \mu_{i0}(P, T, t) + \theta \ln x_i(T, t), \quad (5)$$

где $\mu_{i0}(P, T, t)$ – стандартное значение химического потенциала фазы i , $\theta = k_B T$ – температура системы в энергетических единицах измерения, k_B – постоянная Больцмана. Подстановка формул (4) в (5) приводит к выражениям

$$\mu_1 = \mu_{10} - \theta \ln 2 + \theta \ln(1 + \eta), \quad (6)$$

$$\mu_2 = \mu_{20} - \theta \ln 2 + \theta \ln(1 - \eta). \quad (7)$$

Вычислим сумму и разность величин (6) и (7)

$$\mu_p = \mu_1 + \mu_2 = g_0 + \theta \ln(1 - \eta^2), \quad (8)$$

$$\mu_n = \mu_1 - \mu_2 = g_1 + \theta \ln\left(\frac{1 + \eta}{1 - \eta}\right), \quad (9)$$

здесь параметрические функции

$$g_0 = \mu_{10} + \mu_{20} - 2\theta \ln 2 \text{ и } g_1 = \mu_{10} - \mu_{20}.$$

2. ПОЛНАЯ ЭНЕРГИЯ ГИББСА СИСТЕМЫ И ЭНЕРГИЯ РАЗЛИЧИЯ ФАЗ

Полная энергия Гиббса двухфазной системы из расчета на единицу ее объема равна

$$g_p = \mu_1 x_1 + \mu_2 x_2 = \frac{1}{2} \{g_0 + g_1 \eta + \theta [(1 + \eta) \ln(1 + \eta) + (1 - \eta) \ln(1 - \eta)]\} = h - sT, \quad (10)$$

где энтальпия Камерлингга-Оннеса

$$h = \frac{1}{2} (g_0 + g_1 \eta) \quad (11)$$

и конфигурационная энтропия Больцмана

$$s = -\frac{k_B}{2} [(1 + \eta) \ln(1 + \eta) + (1 - \eta) \ln(1 - \eta)], \quad (12)$$

вид которой соответствует идеальному раствору, если записать ее в терминах объемных долей фаз (см., напр., с. 311 работы [8]). Энергию различия кристаллической и аморфной фаз определим формулой

$$g_n = \mu_1 x_1 - \mu_2 x_2 = \frac{1}{2} \{g_1 + g_0 \eta + \theta [(1 + \eta) \ln(1 + \eta) - (1 - \eta) \ln(1 - \eta)]\}. \quad (13)$$

Вычислив первые производные от (10) и (13), найдем экстремумы этих функций

$$\left(\frac{dg_p}{d\eta} \right) \Big|_{\eta=\eta_0} = 0 \Rightarrow \mu_n(\eta_0) = 0 \Rightarrow \eta_0 = -\text{th} \left(\frac{g_1}{2\theta} \right), \quad (14)$$

$$\left(\frac{dg_n}{d\eta} \right) \Big|_{\eta=\eta_1} = 0 \Rightarrow \mu_p(\eta_1) + 2\theta = 0 \Rightarrow \eta_1 = \mp \sqrt{1 - \exp \left[- \left(\frac{g_0}{\theta} + 2 \right) \right]}. \quad (15)$$

Формула (14) отвечает обращению в нуль функции (9) $\mu_n = 0$ при $\eta = \eta_0(T)$, что соответствует выполнению равенств химических потенциалов фаз ($\mu_1 = \mu_2$) для любой точки кривой $\eta_0(T)$. Если параметры порядков (14) и (15) одновременно обращаются в нуль при определенной температуре $T = T_x$, то выполняются равенства ($\theta_x = k_B T_x$, T_x – температура, при которой $\eta_0(T_x) = 0$ и $\eta_1(T_x) = 0$, т.е. $x_1(T_x) = x_2(T_x) = 0.5$)

$$\begin{cases} g_1 = 0 \\ g_0 = -2\theta_x \end{cases}. \quad (16)$$

Экстремумы функций (10) и (13) совпадают, а функции принимают значения

$$\begin{cases} g_p = -\theta_x \\ g_n = 0 \end{cases}. \quad (17)$$

Формула (17) показывает, что обнуление параметров порядка соответствует минимуму энергии Гиббса и достижению равенства энергий Гиббса кристаллической и аморфной фаз.

3. ОБЪЕМНАЯ ДОЛЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ ФАЗЫ И ПАРАМЕТРЫ МОДЕЛИ

Согласно полученным формулам (4 – первое равенство),

(14 – последнее равенство), (10) и (13) – из работы [1], запишем зависимость объемной доли кристаллической фазы от температуры в виде

$$x_1(T, t) = \frac{1}{2} \left[1 - \operatorname{th} \left(a(q) \frac{T - T_x(q)}{T} \right) \right], \quad (18)$$

где экспериментальные зависимости параметров модели от скорости нагрева q аморфного образца $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$ в отличие от работ [1, 2] аппроксимируются функциями

$$a(q) = -287.584 + 80.64 \cdot \lg(q), \quad (19)$$

$$T_x(q) = 603.5 + 44.6 \cdot \sqrt[6]{q}. \quad (20)$$

Отметим, что вместо логарифмической аппроксимации функция (20) представлена степенной функцией с дробным показателем степени, которая существенно улучшает совпадение экспериментальных и теоретических данных для всех измеренных значений скорости нагрева q аморфного образца. На рис. 1 показано сравнение экспериментальных данных и теоретических расчетов для разных скоростей нагрева аморфного образца.

Значения параметров модели для различных значений величины q приведены в табл. 1.

Таблица 1.

Параметры модели идеальных фаз

q	5	10	20	40	80	120	160	200
$T_x(q)$	661.82	668.96	676.98	685.98	696.08	702.55	707.42	711.36
$-a(q)$	231.22	206.94	182.67	158.39	134.12	119.92	109.84	102.03

Параметр $a(q)$ связан с теплотой $H_x(q)$, поглощаемой единичным объемом аморфного сплава при температуре $T_x(q)$, соотношением

$$H_x(q) = a(q) \cdot R \cdot T_x(q). \quad (21)$$

В табл. 2 приведены расчетные значения величины (21).

В случае «изотермической» кристаллизации объемная доля кристаллической фазы в аморфном сплаве $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$

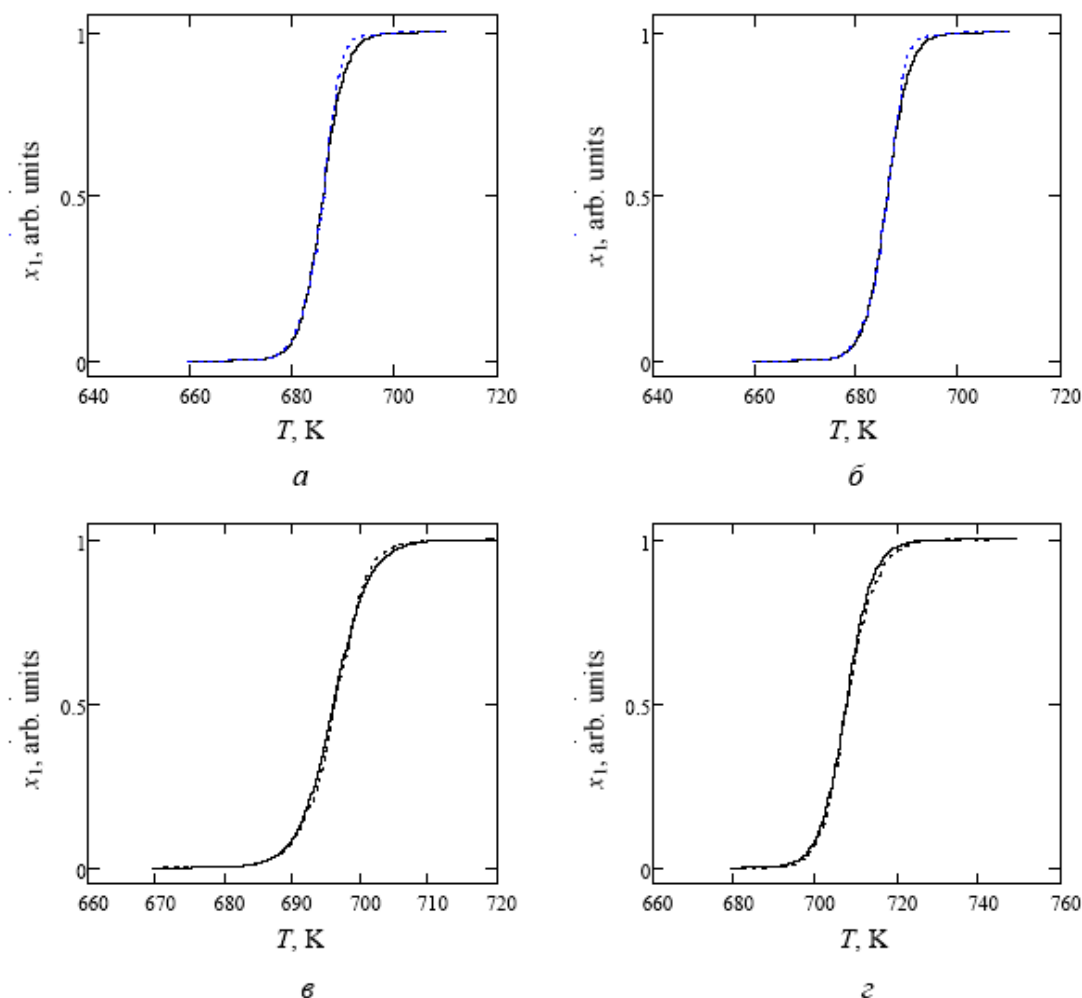


Рис. 1. Температурные зависимости объемной доли кристаллической фазы в металлическом стекле $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$ при $q = 10$ (а); 40 (б); 80 (в); 160 (г) К/мин: сплошные линии – теория, штриховые – эксперимент

Таблица 2.

Теплота $H_x(q)$, поглощаемая единицей объема аморфного сплава при температуре $T_x(q)$

q	5	10	20	40	80	120	160	200
$-H_x(q) \cdot 10^{-6}$	1.272	1.151	1.028	0.903	0.776	0.700	0.646	0.603

описывается формулой

$$x_1(T, t) = \frac{1}{2} \left[1 - \text{th} \left(b \frac{t - t_x}{t_x} \right) \right], \quad (22)$$

где параметры модели, определенные путем минимизации квадратичных отклонений теоретических результатов от экспериментальных данных, приведены в табл. 3.

Таблица 3.

Параметры модели идеальных фаз для случая
«изотермической» кристаллизации

T, K	617	619	622	633	649	662
$-b$	4.82	4.69	4.69	4.48	3.76	3.08
$t_x^{теор.}, s$	14367	10046	7602	1697	361	96
$t_x^{эксп.}, s [3]$	14730	10165	7251	1726	360	94

Из табл. 3 видно, что теоретические (значения получены при подгонке теоретической кривой к экспериментальным данным с минимальной погрешностью по массиву данных) и экспериментальные значения времени t_x , при котором наблюдается максимальная скорость фазового превращения близки по своим значениям. На рис. 2 приведены зависимости объемной доли кристаллической фазы от времени выдержки образца при различных фиксированных температурах.

4. КИНЕТИКА ПРОЦЕССА КРИСТАЛЛИЗАЦИИ

При описании кристаллизации и упорядочения зачастую используют такие допущения [8]:

- коэффициент диффузии компонента термодинамической системы не зависит от времени, координат и концентрации компонентов;
- рост зародышей кристаллической фазы происходит в матрице бесконечных размеров; это указывает на пренебрежение диффузионным взаимодействием между кристаллитами, что затрудняет исследование процесса роста частиц на всех интервалах времени, включая асимптотику кристаллизации (большие времена);
- не учитывается влияние поверхностной энергии растущих зародышей на условия равновесия между кристаллической и матричной фазами.

Рассмотрим кинетику процесса кристаллизации в рамках теорий необратимых процессов Онзагера [4], сродства [5], диссипативных структур [6], обобщенной решеточной модели [7]

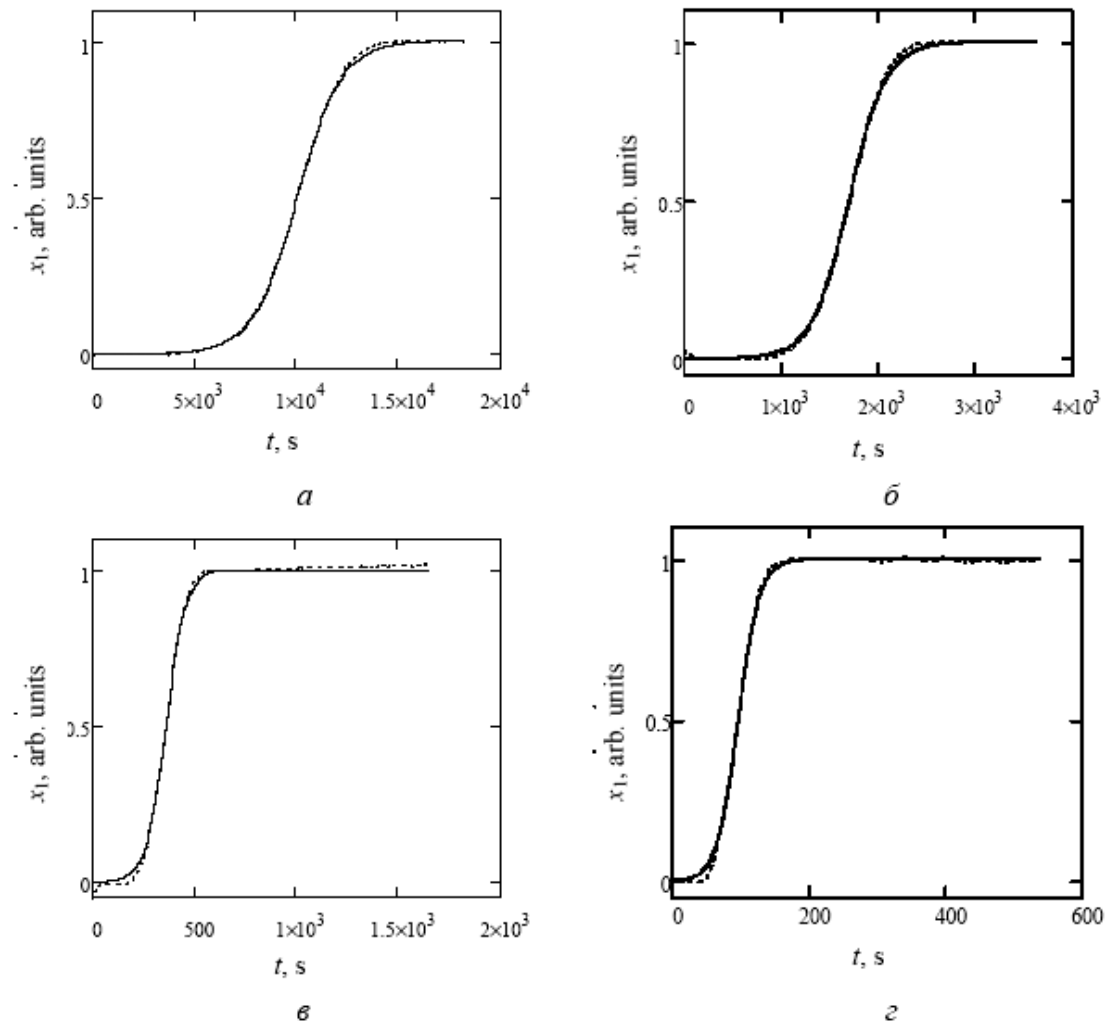


Рис. 2. Временные зависимости объемной доли кристаллической фазы в металлическом стекле $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{V}_6$ при $T = 619$ (а); 633 (б); 649 (в); 662 (г) К: сплошные линии – теория, штриховые – эксперимент

и теории Даркена-Гурри [8, с. 314-316]. Введем следующие ограничения:

- скорость изменения объемной доли фазы равна скорости ее превращения в другую фазу;
- скорость фазового превращения определяет интенсивность σ_i ($i = 1, 2$) источника (стока) каждой фазы и пропорциональна объемной доле другой фазы (другими словами, каждая из фаз является источником зарождения (или стоком) для иной фазы);
- изменения объемных долей фаз определяются случайными процессами зарождения одной из фаз. В любой момент времени t эти процессы вызывают спорадические изменения пара-

метра порядка в выбранной точке r бесконечного по размерам образца.

Первые два допущения сводятся к выполнению уравнения (с учетом равенства (2))

$$\frac{dx_1}{dt} = \dot{x}_1 = \sigma_1 = k_1 x_2 = k_1 (1 - x_1), \quad (23)$$

где $k_1(P, T, t)$ – кинетический коэффициент превращения фазы 1 в фазу 2, который зависит от внешних параметров (давления P и температуры T) и времени t .

Из формулы (23) видно, что в начальный момент времени начала процесса упорядочения ($x_1(0)=0$) коэффициент k_1 равен начальной скорости изменения объемной доли кристаллической фазы ($k_1 = \dot{x}_1(0)$). Используя начальное условие $x_1(0) = 0$ и полагая зависимость от времени коэффициента $k_1 = k(P, T)nt^{n-1}$ (или $k_1 = k^n(P, T)nt^{n-1}$ – в виде формулы Аврами), приходим к известной формуле модели Колмогорова-Джонсона-Мела-Аврами [9] после интегрирования дифференциального уравнения (23):

$$x_1 = 1 - \exp(-kt^n). \quad (24)$$

Таким образом, уравнение (24) не учитывает «диффузионное» взаимодействие фаз, т.е. получено при условии пренебрежения третьей гипотезой, принятой в данной работе.

Применение всех гипотез и результатов работ [4-8] позволяет в неравновесном случае записать кинетические уравнения (конвективным движением в фазах пренебрегаем) для объемных долей фаз (1)

$$\frac{\partial x_1}{\partial t} + \text{div } \mathbf{J}_1 = \sigma_1, \quad (25)$$

$$\frac{\partial x_2}{\partial t} + \text{div } \mathbf{J}_2 = \sigma_2, \quad (26)$$

где поток фазы i равен $\mathbf{J}_i = -L_i \nabla(\mu_i / \theta)$, $L_i = D_i x_i$ – кинетический коэффициент Онзагера, связанный с коэффициентом «диффу-

зии» (коэффициентом упорядочения-разоупорядочения) фазы D_i , $\sigma_1 = k_1 x_2$, $\sigma_2 = k_2 x_1$, k_i – кинетические коэффициенты превращения фаз друг в друга. Рассмотрим некоторые из возможных вариантов:

1. При фиксированных значениях внешних параметров (давления P и температуры T), отсутствии фазовых превращений ($\sigma_i = 0$) и потоков на бесконечности сумма уравнений (25) и (26) (с учетом равенства (2)) приводится к соотношению

$$J_1 + J_2 = 0. \quad (27)$$

Формула (27) указывает на то, что оговоренные ограничения приводят к взаимному проникновению фаз друг в друга.

2. При наличии реакции превращения сумма уравнений (25) и (26) с учетом уравнений (2) и (4), приводит к уравнению

$$\operatorname{div}(-D\nabla\eta) = w_1 + w_2\eta, \quad (28)$$

здесь $D = \frac{D_1 - D_2}{2}$, $w_1 = \frac{k_2 + k_1}{2}$, $w_2 = \frac{k_2 - k_1}{2}$. При равенстве коэффициентов «диффузии» фаз ($D_1 = D_2$) параметр порядка определяется кинетическими коэффициентами реакций превращения: $\eta = -w_1 / w_2 = (k_1 + k_2) / (k_1 - k_2)$.

3. При почленном вычитании из (25) выражения (26) находим (с учетом (2)-(4))

$$\frac{\partial\eta}{\partial t} + \operatorname{div}(-D^*\nabla\eta) = -w_2 - w_1\eta, \quad (29)$$

здесь $D^* = \frac{D_1 + D_2}{2}$. С другой стороны, применение теории Онзагера с движущей силой процесса упорядочения (9) приводит к уравнению

$$\frac{\partial\eta}{\partial t} + \operatorname{div}\left(-\frac{L}{1-\eta^2}\nabla\eta\right) = \sigma, \quad (30)$$

где L – кинетический коэффициент Онзагера, σ – интенсивность источника (стока) упорядочения. Сравнение уравнений (29) и (30) приводит к формулам

$$L = D^*(1-\eta^2), \quad \sigma = -w_2 - w_1\eta. \quad (31)$$

Из (31) видно, что обращение в нуль параметра порядка (14) $\eta=0$, приводит к равенству кинетического коэффициента Онзагера коэффициенту «диффузии», а интенсивность источника (стока) порядка становится равной $\sigma|_{\eta=0} = -w_2$. Достижение реакцией превращения термодинамического равновесия ($\sigma = 0$) приводит к локальному сохранению параметра порядка

$$\eta = -w_2 / w_1 = (k_1 - k_2) / (k_1 + k_2), \quad (32)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} + \operatorname{div}(-D^* \nabla \eta) = 0. \quad (33)$$

5. РОСТ СФЕРИЧЕСКОГО ЗАРОДЫША

Рассмотрим рост сферического зародыша в аморфной матрице без учета деформаций [10], но при реализации фазового превращения в отличии, например, от положений работы [11]. Складывая уравнения (28) и (29), получим

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} + \operatorname{div}(-D_1 \nabla \eta) = k_1(1 - \eta). \quad (34)$$

Полагая коэффициент D_1 постоянной величиной и переходя в сферическую систему координат, перепишем уравнение (34) в виде (зависимостью параметра порядка от угловых координат пренебрегаем, т.е. рост зародыша по всем углам происходит равномерно [12])

$$\frac{\partial \eta}{\partial \tau} + \frac{\partial^2 \eta}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \eta}{\partial r} = \alpha(1 - \eta), \quad (35)$$

где $\tau = D_1 t / l^2$ – безразмерное время, l – характерная длина задачи, $r = R / l$ – безразмерный радиус зародыша R , $\alpha = k_1 l^2 / D_1$ – параметр фазового превращения.

Решение уравнения (35) будем искать в виде

$$\eta = 1 - \exp[-\int \alpha d\tau + f(r, \tau)], \quad (36)$$

которое преобразует уравнение (35) в уравнение

$$\frac{\partial f}{\partial \tau} + \frac{\partial^2 f}{\partial r^2} + \left(\frac{\partial f}{\partial r}\right)^2 + \frac{2}{r} \frac{\partial f}{\partial r} = 0. \quad (37)$$

Рассмотрим функции, удовлетворяющие уравнению (37):

а) *стационарная функция*

$$f(r, \tau) = \varphi(x), \quad (38)$$

где $x = 1/r$. Подстановка (38) в (37) приводит к обыкновенному дифференциальному уравнению второго порядка

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \left(\frac{d\varphi}{dx}\right)^2 = 0, \quad (39)$$

которое имеет два решения

$$\varphi\left(\frac{1}{r}\right) = \ln C_2, \quad \varphi\left(\frac{1}{r}\right) = \ln\left(\frac{C_1}{r} + C_2\right). \quad (40)$$

где C_i ($i=1,2$) – постоянные интегрирования уравнения (39).

Таким образом, сферический зародыш (для случая стационарной функции) растет по одному из законов:

$$\eta_1 = 1 - \exp(-\int \alpha d\tau + \ln C_2), \quad (41)$$

$$\eta_2 = 1 - \exp(-\int \alpha d\tau + \ln\left(\frac{C_1}{r} + C_2\right)). \quad (42)$$

Отметим, что с ростом радиуса зародыша выражение (42) стремится к виду (41). Отсюда вытекает, что решение (42) содержит как частный случай (41) при больших радиусах зародыша.

б) *автомодельная функция*

$$f(r, \tau) = \psi(\xi), \quad (43)$$

где $\xi = r^2 / \tau$. Подстановка (43) в (37) приводит к обыкновенному дифференциальному уравнению второго порядка

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + \left(\frac{d\psi}{d\xi}\right)^2 + \left(\frac{3}{2\xi} - \frac{1}{4}\right)\frac{d\psi}{d\xi} = 0, \quad (44)$$

которое заменой $y(\xi) = d\psi / d\xi$ сводится к дифференциальному уравнению Риккати общего вида $y'_x = f(x)y^2 + g(x)y + h(x)$ (см., напр., [13])

$$\frac{dy}{d\xi} + y^2 + \left(\frac{3}{2\xi} - \frac{1}{4}\right)y = 0, \quad (45)$$

где $f(x) = -1$, $g(x) = \frac{1}{4} - \frac{3}{2x}$, $h(x) = 0$. Решение (45) имеет вид

$$y(\xi) = \frac{\Phi(\xi)}{C_1 + \int \Phi(\xi) d\xi}, \quad (46)$$

а функция

$$\Phi(\xi) = \frac{C}{\xi\sqrt{\xi}} \exp(\xi/4). \quad (47)$$

Следовательно, автомодельная функция (43) определяется формулой

$$f(r, \tau) = \int y(\xi) d\xi + C_2, \quad \xi = r^2 / \tau. \quad (48)$$

Проведенный анализ показывает, что механизмы процесса упорядочения при стационарных (случай а)) и нестационарных условиях (случай б)) существенно отличаются друг от друга.

Если размеры системы достаточно велики по сравнению с размером зародыша, то существует вероятность того, что фазы в локальной области могут прийти в термодинамическое равновесие. Тогда параметр порядка определяется с одной стороны формулой (14), а с другой – формулой (36). Это позволяет в момент времени τ связать энергетическую температуру системы θ с размером зародыша r соотношением

$$\theta = \frac{g_1}{2 \operatorname{arctch}\{-1 + \exp[-\int \alpha d\tau + f(r, \tau)]\}}. \quad (49)$$

Согласно формуле (18), параметр g_1 зависит от температуры по формуле

$$g_1 = \lambda(q, T)(\theta - \theta_x), \quad (50)$$

где $\lambda(q, T) = a(q) / \theta$. Из (49) и (50) получаем

$$\theta = \frac{\lambda(q, T)}{\lambda(q, T) + 2 \operatorname{arctch}\{(1 - \exp[-\int \alpha d\tau + f(r, \tau)])\}} \theta_x. \quad (51)$$

Из формулы (51) видно, что выполнение равенства $\theta = \theta_x$ достигается при нулевом значении аргумента экспоненты, т.е. при выполнении равенства

$$\int \alpha d\tau = f(r, \tau). \quad (52)$$

Например, для случая *стационарной функции* (второе равенство (40)) в рамках модели Колмогорова-Джонсона-Мела-Аврами (КДМА) уравнение (52) приводит к соотношению

$$r = \frac{C_1}{\exp(\phi\tau^n) - C_2}, \quad (53)$$

здесь $\phi = l^2k / D_1$. При $C_2 = 0$ радиус зародыша уменьшается экспоненциально с ростом времени, а при выполнении условий: $C_2 = 1$, $l^2k\tau^n / D_1 \ll 1$ – по закону, пропорциональному τ^{-n} . На рис. 3 показаны графики функции (53) при $C_1 = 1$, $C_2 = 1$, $\phi = 0.1$ и различных значениях параметра n , соответствующих как росту зародыша, так и его растворению.

Из рис. 3 видно, что при положительном значении постоянной $C_1 > 0$: взрывной кристаллизации [14-16] (рост зародышей с увеличивающейся скоростью) отвечают значения $n < -1$; при $n = -1$ наблюдается рост кристаллов с постоянной скоростью при наличии малого участка перехода от нулевой скорости роста к постоянной величине; при $-1 < n < 0$ увеличение размеров сферического зародыша происходит с замедляющейся скоростью. При отрицательном значении $C_1 < 0$ и положительных величинах показателя степени $n > 0$ наблюдается скачкообразное возникновение зародышей с различным начальным участком поведения скорости роста, после чего происходит ускоренный рост кристаллита.

При реализации *автомодельной функции* интегрирование (48) приводит к функции

$$\psi(\xi) = C_2 + \ln(C_1 + \int \Phi(\xi) d\xi), \quad (54)$$

вид которой показан на рис. 4.

Из формулы (54) видно, что автомодельное решение имеет смысл только при выполнении неравенства

$$C_1 + \int \Phi(\xi) d\xi > 0, \quad (55)$$

которое определяет интервал существования автомодельного решения, как это видно из рис. 4. Из соотношения (52) следует, что в рамках модели КДМА аналогичное поведение будет

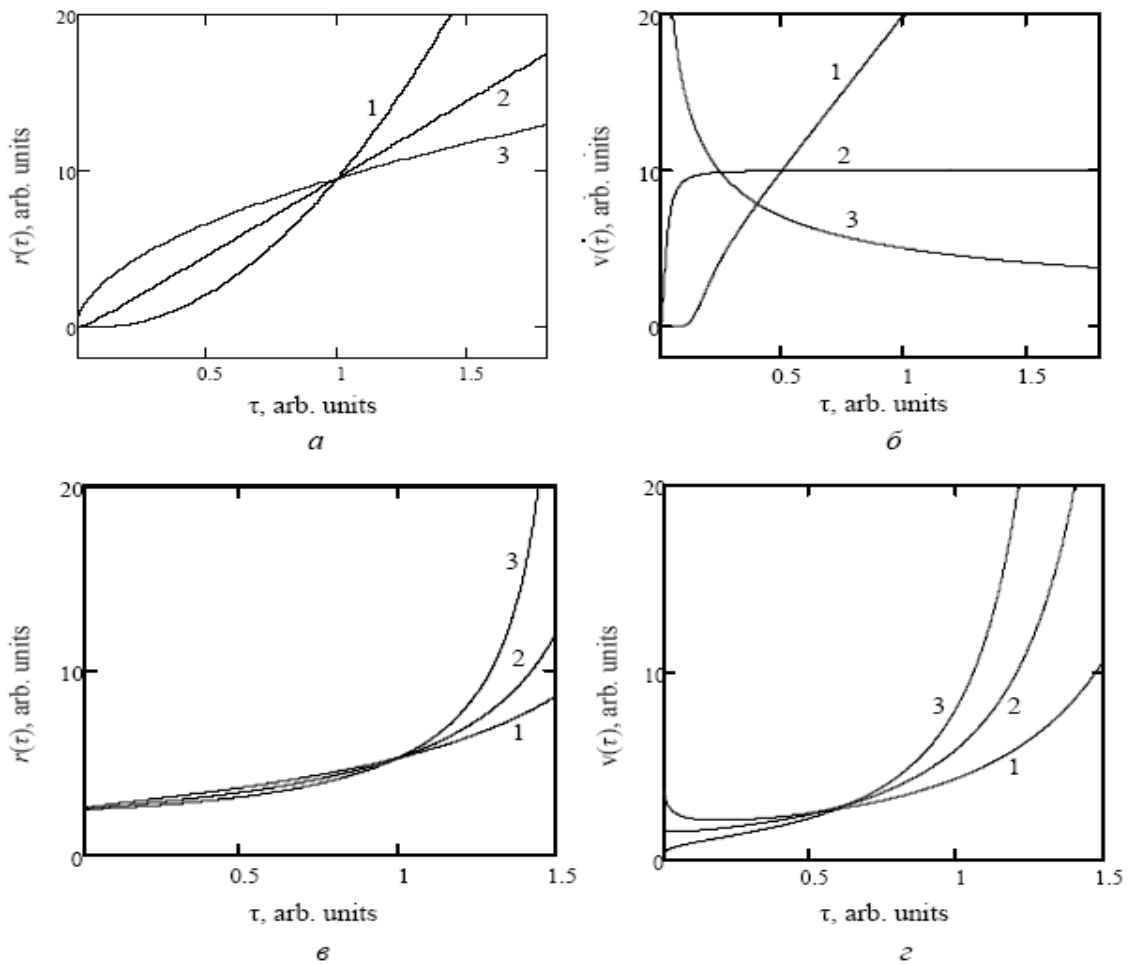


Рис. 3. Временные зависимости радиуса сферического зародыша кристалла (*a*, *в*) и скорости роста (*б*, *г*): 1) при положительном параметре $C_1 = 1$ и различных значениях показателя степени (*a*, *б*): $n = -2.0$ (1) – возрастающая скорость; $n = -1.0$ (2) – постоянная скорость; $n = -0.5$ (3) – замедляющаяся скорость; 2) при отрицательном параметре $C_1 = -0.5$ и различных значениях показателя степени (*в*, *г*): $n = 0.7$ (1); $n = 0.95$ (2); $n = 1.3$ (3)

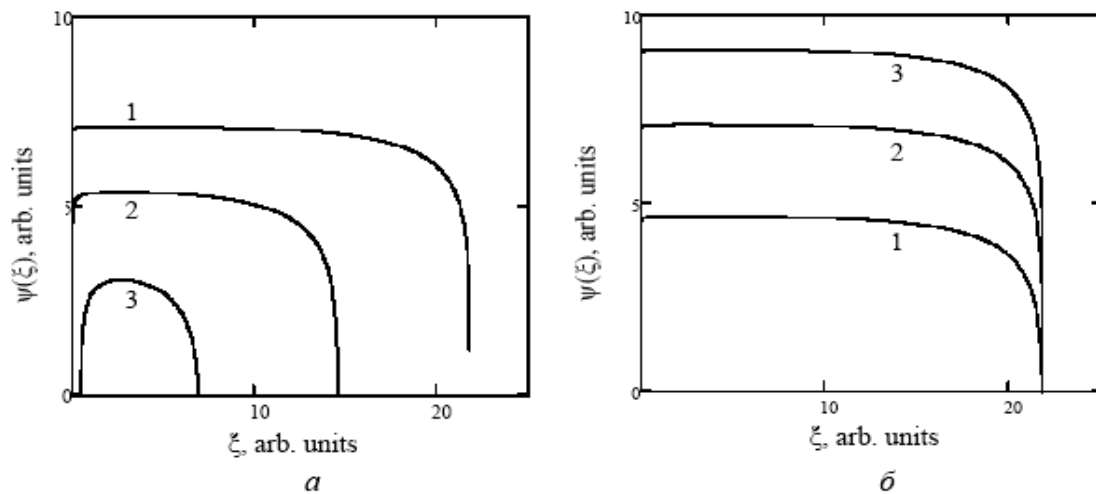


Рис. 4. Графики автомодельной функции при различных значениях параметров C_1 (*a*) и C_2 (*б*): *a*) $C_1 = 4.5$ (1); $C_1 = 20.0$ (2); $C_1 = 100.0$ (3) и $C_2 = 2.5$; *б*) $C_2 = 0.05$ (1); $C_2 = 2.5$ (2); $C_2 = 4.5$ (3) и $C_1 = 100.0$

демонстрировать приведенное время $\tau(\xi)$, что противоречит физически наблюдаемым явлениям.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Модель идеальных фаз адекватно описывает размытый фазовый переход в аморфном сплаве $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$ при установленных по экспериментальным данным зависимостям параметров теоретической модели $T_x(q)$ и $a(q)$ от скорости нагрева образца q .

2. Теплота, поглощаемая аморфным материалом, при изменении скорости нагрева образца q от 200 до 5 К/мин лежит в диапазоне $(-1.272 \dots -0.603) \cdot 10^6$ J/mol.

3. Показано, что модель КДМА не учитывает «диффузионное» взаимодействие фаз при протекании процесса кристаллизации.

4. Закономерности роста сферического зародыша в стационарных и нестационарных условиях существенно различаются. Для модели КДМА и стационарной функции установлена зависимость радиуса сферического зародыша от времени при достижении температуры T_x .

Автор искренне благодарен д.ф.-м.н. В.И. Ткачу за предоставление массива экспериментальных данных по аморфному сплаву $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$ и конструктивные критические замечания, которые способствовали значительному улучшению содержания представленной работы.

1. С.В. Терехов, ФТВД **28**, 1, 54 (2018).

2. С.В. Терехов, А.И. Лимановский, ФТВД **28**, 3, 65 (2018).

3. С.В. Васильев, В.И. Парфений, Т.В. Цветков, В.И. Ткач, ФТВД **28**, 4, 66 (2018).

4. L. Onsager, Phys. Rev. **37**, № 4, 405; Phys. Rev. **38**, № 12, 2265 (1931).

5. Т. де Донде, П. ван Руссельберг, Термодинамическая теория сродства (книга принципов), Металлургия, Москва (1984).

6. И. Пригожин, Д. Кондепуди, Современная термодинамика. От тепловых двигателей до диссипативных структур, Мир, Москва (2002).
7. С.В. Терехов, Моделирование тепловых и кинетических свойств реальных систем, «Вебер» (Донецкое отд.), Донецк (2007).
8. Физическое материаловедение. Т. 5. Материалы с заданными свойствами / Под общей ред. Б.А. Калина, МИФИ, Москва (2008).
9. Дж. Кристиан, Теория превращений в металлах и сплавах, Мир, Москва (1978).
10. А.Г. Князева, Я.Г. Донская, Физика горения и взрыва **33**, 2, 52 (1997).
11. М.В. Дудоров, А.Д. Дрозин, В.Е. Роцин и др., Вестник ЮУрГУ, 11, 78 (2012).
12. А.Н. Колмогоров, Известия АН СССР. Сер. математ. **1**, 3, 355 (1937).
13. A.D. Polyanin, V.F. Zaitsev, Handbook of Exact Solutions for Ordinary Differential Equations, 2nd Edition, Chapman & Hall / CRC, Boca Raton, (2003).
14. В.А. Шкловский, В.М. Кузьменко, УФН **157**, 2, 311 (1989).
15. В.Я. Когай, Письма в ЖТФ **40**, 15, 14 (2014).
16. К.А. Богоносков, Высокоскоростная кристаллизация меди и ее соединений в низкотемпературной лазерной плазме. Дис. ... учен. степ. канд. тех. наук, МГУТУ им. К.Г. Разумовского, Москва (2014).

Terekhov S.V.

THE WASHED OUT PHASE TRANSITION IS IN THE AMORPHOUS ALLOY OF $Fe_{40}Ni_{40}P_{14}B_6$: THERMODYNAMICS OF PHASES AND KINETICS OF ORGANIZATION

The before offered model of ideal phases is applied for definition of experimental data on the amorphous alloy of $Fe_{40}Ni_{40}P_{14}B_6$. A good consent is shown between experimental data and theoretical calculations at description of temperature and temporal dependences of by volume stake of crystalline phase. From experimental data dependences of model parameters are set on speed of heating of amorphous standard. The «diffusive» model of process of orga-

nization is offered. It is shown that the model of Kolmogorov-Johnson-Mehl-Avrami does not take into account casual co-operations of phases at flowing of process of organization. The height of spherical embryo is described by kinetic equalization the decisions of which are a stationary function and function with an automodel argument. The condition of achievement of temperature which an inflectionpoint of chart of temperature dependence of by volume stake of crystalline phase is at is set.

Keywords: by volume stake, crystalline phase, parameter of order, chemical potential, energy of Gibbs, temperature, metallic glass

Fig. 1. Temperature dependences of by volume stake of crystalline phase in metallic glass of $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$ at $q = 10$ (a); 40 (б); 80 (в); 160 (г) K/min: continuous lines are a theory, stroke is an experiment

Fig. 2. Temporal dependences of by volume stake of crystalline phase in metallic glass of $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$ at $T = 619$ (a); 633 (б); 649 (в); 662 (г) K: continuous lines are a theory, stroke is an experiment

Fig. 3. Temporal dependences of radius of spherical embryo of crystal (a, в) and speed of height (б, г): 1) at a positive parameter $C_1 = 1$ and different values of index of degree (a, б): $n = -2.0$ (1) – increasing speed; $n = -1.0$ (2) – permanent speed; $n = -0.5$ (3) – the slowed speed; 2) at a negative parameter $C_1 = -0.5$ and different values of index of degree (в, г): $n = 0.7$ (1); $n = 0.95$ (2); $n = 1.3$ (3)

Fig. 4. Charts of automodel function at the different values of parameters C_1 (a) and C_2 (б): a) $C_1 = 4.5$ (1); $C_1 = 20.0$ (2); $C_1 = 100.0$ (3) and $C_2 = 2.5$; б) $C_2 = 0.05$ (1); $C_2 = 2.5$ (2); $C_2 = 4.5$ (3) and $C_1 = 100.0$

Table. 1. Parameters of model of ideal phases

Table. 2. Warmth, taken in by an amorphous alloy in washed out phase transition

Table. 3. Parameters of model of ideal phases for the case of «isothermal» crystallization

52. Физика и техника высоких давлений.

Донецк, 2019, т. 29, № 3, с. 65-72

PACS: 61.43.Dq, 64.70.pe, 81.10.Aj

Терехов С.В.¹, Запорожец В.Д.²

**ГРАНИЦЫ ТЕРМИЧЕСКОЙ УСТОЙЧИВОСТИ АМОРФНОГО
МАТЕРИАЛА. I. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ФАЗ В ПРИБЛИЖЕНИИ
СРЕДНЕГО ПОЛЯ**

¹Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина

²Донецкий национальный университет

Статья поступила в редакцию 18 июня 2019 года

При использовании ранее установленных зависимостей модельных параметров от скорости прогрева образца построена поверхность кристаллизации, т.е. график функции, описывающей объемную долю кристаллитов, от температуры и скорости прогрева. В приближении среднего поля исследована термическая устойчивость аморфного материала. Показано существование «диффузионной» спинодали (спинодали упорядочения), лежащей в области метастабильных фазовых состояний. Существование спинодали объяснено неустойчивостью метастабильной фазы по отношению к изменению параметра порядка в определенном интервале значений. При этом возможна реализация такого феномена, как самосборка фазовых областей в результате «восходящей» диффузии. Ее появление связано с тем, что эффективный коэффициент диффузии может стать отрицательной величиной. Установлено, что приближения среднего поля недостаточно для определения вида границы абсолютной неустойчивости.

Ключевые слова: аморфный материал, параметр порядка, химический потенциал, взаимодействие фаз, энергия Гиббса, кривые устойчивости

² Запорожец В.Д. – студент 5 курса физико-технического факультета Донецкого национального университета

1. ВВЕДЕНИЕ

Аморфные материалы обладают уникальными свойствами [1]: механическими [2-5], электрическими и магнитными [6-9], тепловыми [10-14], коррозионными и другими. Многие сплавы, не имеющие кристаллической структуры:

- обладают повышенной механической твердостью и высокой прочностью при растяжении;
- имеют большое удельное сопротивление и магнитную индукцию:
- отличаются потерями на вихревые токи в аморфных ферромагнетиках, в 20 раз меньше, чем в текстурованных листах трансформаторной стали;
- характеризуются почти нулевым коэффициентом теплового расширения.

Эти свойства возникают из-за отсутствия дальнего порядка в расположении атомов (следовательно, нет и кристаллической анизотропии), наличия границ зерен и других дефектов структуры, которые наблюдаются в поликристаллических сплавах. Развитие методов получения неупорядоченных структур привело к появлению объемно-аморфных материалов. На практике они применяются в качестве конструкционных и магнитомягких материалов. Из них изготавливают корпуса мобильных телефонов и часов, спортивный инвентарь, сердечники трансформаторов, головки магнитной записи и т.п.

Одной из актуальных проблем современного материаловедения является термическая и временная устойчивость аморфных сплавов [14-17]. Она возникла в связи с необходимостью стабильной работы изделий из аморфных сплавов, каждый из которых имеет свой диапазон рабочих температур. Во многих аморфных материалах на основе железа, кобальта и никеля кристаллизация происходит в течение нескольких минут при температуре порядка 700 К (приблизительно половина темпе-

ратуры плавления). Срок работы изделия увеличивается до нескольких лет, если оно эксплуатируется при температурах не выше 300 К. Поэтому определение границ стабильности аморфных материалов представляет практический и научный интерес.

В работах [18, 19] были исследованы термодинамические модели аморфного сплава $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$ и продемонстрирована адекватность теоретических результатов массиву экспериментальных данных [20]. Автором [21] (с учетом результатов [18]) было получено выражение для объемной доли кристаллитов $x_1 = V_1/V$ (V_1 – объем, занятый кристаллической фазой, V – объем системы) вида

$$x_1(T, t) = \frac{1}{2} \left[1 - \text{th} \left(a(q) \frac{T - T_x(q)}{T} \right) \right], \quad (1)$$

где T – абсолютная температура, а параметры модели $a(q)$ и $T_x(q)$ ($T_x(q)$ – температура достижения максимальной скорости кристаллизации) связаны со скоростью нагрева образца q соотношениями

$$a(q) = -287.584 + 80.64 \cdot \lg(q), \quad (2)$$

$$T_x(q) = 603.5 + 44.6 \cdot \sqrt[6]{q}. \quad (3)$$

Формулы (1)-(3) позволяют построить поверхность кристаллизации сплава, показанную на рис. 1.

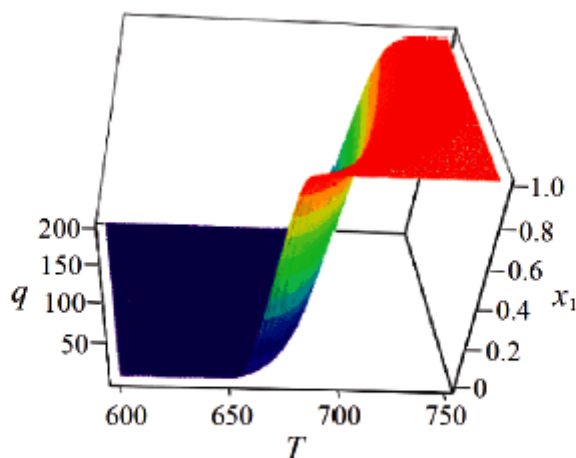


Рис. 1. Поверхность, описывающая зависимость объемной доли кристаллической фазы x_1 в зависимости от температуры T и скорости нагрева q образца

Поверхность кристаллизации дает возможность проследить изменения в кристаллизующемся сплаве, например, при изменении скорости прогрева материала. Это особенно важно для понимания того, как будет работать изделие при изменяющихся погодных условиях. Однако более полную информацию о поведении аморфного материала можно получить при установлении границ устойчивости сплава. Поэтому целью данной работы является исследование стабильности неупорядоченной системы и определение границ ее устойчивости по отношению к изменениям параметра порядка η при учете парного взаимного влияния локально-равновесных областей.

2. ОПИСАНИЕ АМОРФНОЙ СРЕДЫ В ПРИБЛИЖЕНИИ СРЕДНЕГО ПОЛЯ

Предположим, что система разбита на локально-равновесные области двух видов: одни состоят из кристаллитов, а другие определяют аморфную матрицу образца. Области оказывают взаимное влияние друг на друга за счет обмена частицами, энергией и энтропией, так как являются синергетическими системами [22]. В рамках модели [18, 21] взаимодействие фаз аморфной системы учтем в приближении теории среднего поля (модель регулярных растворов, теория Горского-Брэгга-Вильямса, см., напр., [23]).

Энергию Гиббса в расчете на единицу объема запишем в виде:

$$g = W_0 + W_1\eta - \frac{W_2}{2}\eta^2 + \theta[(1 + \eta)\ln(1 + \eta) + (1 - \eta)\ln(1 - \eta)], \quad (4)$$

где коэффициенты W_0 – энергия Гиббса полностью неупорядоченной среды (т.е. при $\eta = 0$), W_1 – энергия, связанная как с влиянием внешней среды на фазы системы, так и с их взаимным воздействием друг на друга; W_2 – энергия упорядочения в приближении попарного влияния локальных областей друг на друга, $\theta = k_B T$, k_B – постоянная Больцмана.

Экстремумы функции (4) удовлетворяют уравнению

$$W_1 - W_2\eta + \theta \ln\left(\frac{1+\eta}{1-\eta}\right) = 0, \quad (5)$$

которое после несложных преобразований можно записать в виде

$$\operatorname{th}\left(\frac{W_2\eta - W_1}{2\theta}\right) = \eta. \quad (6)$$

При значении параметра $W_2 = 0$ и отсутствии взаимодействия фаз уравнение (6) переходит в формулу (9) работы [18], а при $W_1 = 0$ имеет очевидный тривиальный корень $\eta = 0$.

При положительных значениях энергии упорядочения W_2 выделенная локально-равновесная область, вещество которой находится в определенной фазе, будет стремиться окружить себя подобными локально-равновесными областями. Этот процесс должен приводить к распаду всей системы на фазы с образованием их механической смеси. При отрицательных величинах энергии W_2 , выделенная локально-равновесная область окружает себя областями с иной фазой, что приводит к наноструктурированию образца.

Введем новую переменную $z = \frac{W_2\eta - W_1}{2\theta}$ и перепишем (6) в виде

$$\operatorname{th}z = k_1z + k_2, \quad (7)$$

где величины $k_1 = 2\theta/W_2$ и $k_2 = W_1/W_2$. Решение уравнения (7) сводится к поиску точки пересечения прямой $y(z) = k_1z + k_2$ с графиком функции $y(z) = \operatorname{th}z$. На рис. 2 показаны левая $y(z) = \operatorname{th}z$ и правая $y(z) = k_1z + k_2$ части уравнения (7) при положительной или отрицательной энергии упорядочения фаз W_2 .

Из рис. 2,*a* видно, что при фиксированном коэффициенте $k_1 = 0.25$ и:

- 1) $|k_2| > 0.55$ любая локально-равновесная область находится

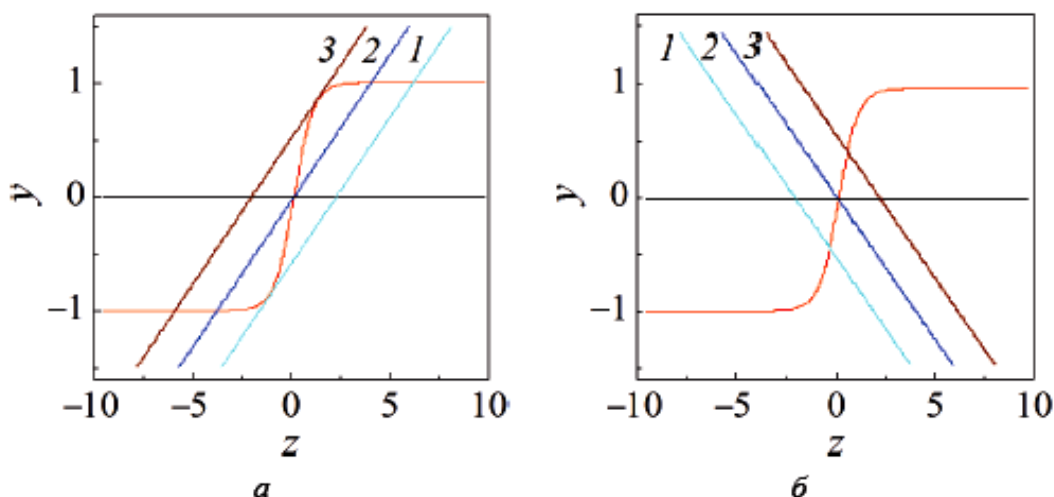


Рис. 2. Нахождение значения параметра порядка η при положительной (а) и отрицательной (б) величинах энергии упорядочения W_2 и различных значениях коэффициентов: $k_1 = 0.25$ (а) и -0.25 (б); $k_2 = -0.55$ (1), 0.0 (2) и 0.55 (3); красная линия – график функции $y(z) = thz$

в одном фазовом состоянии, определяемым знаком этого коэффициента (если $k_2 < -0.55$, то область находится в фазе 1, а для $k_2 > 0.55$ – в фазе 2);

2) $|k_2| \leq 0.55$ в системе наблюдаются локально-равновесные области как в чистых, так и в смешанных фазовых состояниях с различными фазовыми составами.

Рис. 2,б ($k_1 = -0.25$) демонстрирует существование систем только со смешанными фазовыми состояниями, если значения параметра k_2 принадлежит интервалу $[-1.55; 1.55]$. За пределами этого интервала любая локально-равновесная область находится или в фазе 1 ($k_2 > 1.55$), или в фазе 2 ($k_2 < -1.55$).

3. «ДИФФУЗИОННАЯ» СПИНОДАЛЬ (СПИНОДАЛЬ УПОРЯДОЧЕНИЯ)

Согласно модельным представлениям [23] коэффициент эффективной диффузии пропорционален второй производной от энергии Гиббса по параметру порядка. Если этот коэффициент становится отрицательным в некотором диапазоне значений параметра порядка, то в системе наблюдается «восходящая» диффузия, т.е. одинаковые области стремятся к объ-

единению. Это явление может приводить к самосборке структур в образце. Поэтому вычислим вторую производную от энергии Гиббса (4) и приравняем ее к нулю

$$-W_2 + \theta \left(\frac{1}{1+\eta} + \frac{1}{1-\eta} \right) = 0. \quad (8)$$

Уравнение (8) определяет границу устойчивости аморфного материала по отношению к случайным флуктуациям параметра порядка. Кривую, которая описывается уравнением (8), назовем «диффузионной» спинодалью или спинодалью упорядочения.

Преобразуем (8) к виду

$$\tau = 1 - \eta^2, \quad (9)$$

где $\tau = 2\theta/W_2$ является положительной величиной только тогда, когда энергия упорядочения W_2 положительна. Кривая (9) представляет собой параболу с ветвями, направленными вниз, а ее максимум находится в точке $(\eta = 0, T_x)$ и она разделяет область метастабильных состояний на области, прилегающие к зоне абсолютной неустойчивости системы (пространство под параболой) и области, граничащие с бинодалью упорядочения (пространство над параболой и под бинодалью упорядочения, рис. 3 и 4).

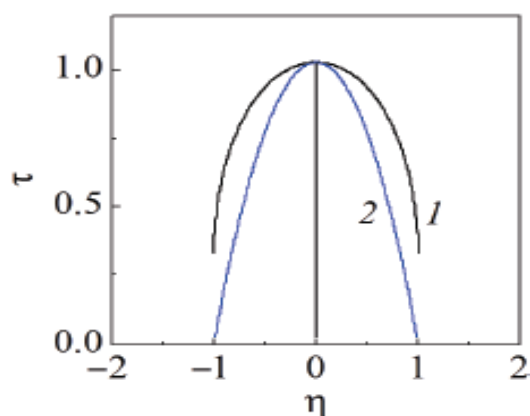


Рис. 3. Бинодаль (кривая 1) и «диффузионная» спинодаль (кривая 2) в модели среднего поля при $\alpha = 2 \cdot 10^{-6}$

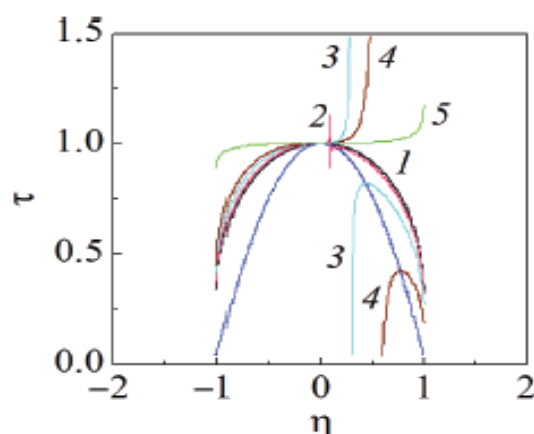


Рис. 4. Изменение вида бинодали при вариации параметра α : 1 – $2 \cdot 10^{-6}$, 2 – $9 \cdot 10^{-2}$, 3 – 0.3, 4 – 0.6, 5 – 15.0

Бинодаль отделяет метастабильные фазовые состояния от устойчивых. Если кристаллизация аморфного материала описывается уравнением (1), то энергию W_1 можно представить по формуле вида (50) из [21]

$$W_1 = -2a(\theta - \theta_x), \quad (10)$$

здесь $\theta_x = k_B T_x$. Полагая $W_2 = 2\theta_x$, получим из (5) для бинодали уравнение

$$\tau = \frac{a - \eta}{a - 0.5 \ln \left(\frac{1 + \eta}{1 - \eta} \right)}. \quad (11)$$

«Диффузионная» спинодаль отличается от истинной кривой абсолютной неустойчивости тем, что:

- в области под кривой наблюдается «восходящая» диффузия;
- в состояниях, которые характеризуются точками этой спинодали, частицы малоподвижны, так как обращаются в нуль эффективные коэффициенты диффузии;
- над спинодалью диффузия происходит по классическим законам Фика, однако при приближении термодинамической системы к состояниям вблизи «диффузионной» спинодали, коэффициенты самодиффузии компонентов материала могут различаться по порядку величины.

При учете только парных взаимодействий фаз вид бинодали зависит от количественного значения параметра a (правая часть рис. 3). С увеличением этой величины происходит разрыв бинодали по резонансному типу, так как в нуль обращается знаменатель дроби в формуле (11).

Отметим, что аморфная ветвь бинодали (на правой части рис. 3 – это левая область от 0 по аргументу η) при изменении параметра a от $2 \cdot 10^{-6}$ до 0.6 практически не изменяется. Максимум кристаллической ветви перемещается по «диффузионной» спинодали и уменьшается по величине. При достаточно больших значениях параметра a бинодаль вырождается в кубическую параболу с прямолинейным участком на интервале

изменения параметра порядка η . Это означает, что различным степеням упорядочения будет соответствовать одна и та же температура T_x .

Для нахождения вида границы абсолютной неустойчивости надо вычислить третью производную от выражения (4) или первую производную от соотношения (8), что приводит к нулевому значению температуры. Таким образом, учет парных взаимодействий локально-равновесных областей с различными фазовыми состояниями недостаточен для установления формы истинной спинодали упорядочения.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Развитие модельных представлений об аморфных материалах позволяет установить зависимости параметров модели от скорости прогрева образца и описать экспериментальный массив данных по объемной доле кристаллитов в системе. Полученные формулы были применены для построения поверхности кристаллизации, т.е. зависимости объемной доли кристаллической фазы от температуры и скорости прогрева. С целью установления вида кривых устойчивости аморфного материала было проведено его исследование в приближении среднего поля. Были получены уравнения бинодали и «диффузионной» спинодали, которая лежит в области метастабильных фазовых состояний. Если эффективный коэффициент диффузии становится отрицательной величиной в некотором интервале изменения параметра порядка, то возможным становится явление самосборки структур из-за явления «восходящей» диффузии. Для нахождения вида кривой абсолютной неустойчивости необходимо учитывать взаимодействие трех и более локально-равновесных областей с различными фазовыми состояниями.

1. *И.В. Золотухин, Ю.Е. Каплин, УФН 160, № 9, 75 (1990).*

2. *А.М. Глейзер, Б.В. Молотилов*, Структура и механические свойства аморфных сплавов, Металлургия, Москва (1992).
 3. *Г. Абросимова, А. Аронин, О. Баркалов и др.*, ФТТ **53**, 2, 215 (2011).
 4. *О.И. Баркалов*, Переходы кристалл-аморфное состояние при нормальном и высоком давлении в системах с полупроводниковыми фазами, Автореф. дис. ... уч. степ. д. ф.-м. н., Институт ФТТ РАН, Черноголовка (2002).
 5. *Д.А. Калашник, В.А. Шаповалов, И.В. Шейко и др.*, Современная электроталлургия, 3, 27 (2015).
 6. *Ю.Н. Гойхенберг, В.Е. Роцин, С.И. Ильин*, Вестник ЮУрГУ, 14, 24 (2011).
 7. *Р.А. Назипов, А.В. Митин, Н.А. Зюзин*, Ученые записки Казанского государственного университета **147**, 2, 80 (2005).
 8. *Т.Р. Чуева*, Разработка «толстых» аморфных микропроводов в системе $Fe_{75}Si_{10}B_{15}-Co_{75}Si_{10}B_{15}-Ni_{75}Si_{10}B_{15}$, Дис. ... уч. степ. к. т. н., Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН, Москва (2014).
 9. *Е.Е. Шалыгина, М.А. Комарова, В.В. Молоканов*, ЖЭТФ **122**, 3(9), 593 (2002).
 10. *С.Ф. Забелин, В.А. Зеленский*, Ученые записки ЗабГГПУ, 62 (2012).
 11. *В.А. Хоник*, Термическое расширение аморфных сплавов, Сб. научн. трудов «Новые материалы электронной техники», ВПИ, Воронеж, 35 (1983).
 12. *В.А. Хоник, В.А. Зеленский*, ФММ **67**, 1, 192 (1989).
 13. *С.Б. Ломов, Т.В. Соколова, М.Ю. Малькова, А.Н. Задиранов*, Труды ВИАМ, 2 (50), 18 (2017).
 14. *А.А. Щерецкий, В.Л. Лахненко, В.С. Шумихин, В.А. Соловьева*, Особенности перехода аморфных сплавов на основе алюминия в кристаллическое состояние при термическом и механическом воздействии, Сб. научн. тр. «Электронная микроскопия и прочность материалов», ИПМ НАНУ, Киев, 57 (2010).
-

15. В.К. Носенко, Е.А. Сегиди, А.А. Назаренко и др., Наносистемы, наноматериалы, нанотехнологии **11**, 1, 57 (2013).
16. В.С. Шумихин, А.А. Щерецкий, В.Л. Лахненко, А.А. Беспальный, Наносистемы, наноматериалы, нанотехнологии **7**, 3, 901 (2009).
17. А.М. Глейзер, Е.Н. Блинова, И.Е. Пермякова, А.О. Чертаева, Известия РАН. Серия физическая **79**, 9, 1288 (2015).
18. С.В. Терехов, ФТВД **28**, 1, 54 (2018).
19. С.В. Терехов, А.И. Лимановский, ФТВД **28**, 3, 65 (2018).
20. С.В. Васильев, В.И. Парфений, Т.В. Цветков, В.И. Ткач, ФТВД **28**, 4, 66 (2018).
21. С.В. Терехов, ФТВД **29**, 2, 24 (2019).
22. С.В. Терехов, В.Н. Варюхин, Т.Н. Мельник, В.М. Юрченко, ФТВД **27**, 1, 103 (2017).
23. С.В. Терехов, Моделирование тепловых и кинетических свойств реальных систем, Вебер (Донецкое отделение), Донецк (2007).

Terekhov S.V., Zaporozhets V.D.

With the use of the heating rate dependences of model parameters found earlier, the surface of crystallization is built, i.e. plot of temperature and heating rate dependent volume fraction of crystallites. Thermal stability of an amorphous material is studied in the middle-field approximation. The existence of «diffusive» spinodal (the spinodal of ordering) in the area of the metastable phase states is shown. The existence of the spinodal is explained by instability of the metastable phase with respect to the change of order parameter within a certain interval of values. Realization of self-assembly of phase areas as a result of «ascending» diffusion becomes possible. This fact is related to that the effective coefficient of diffusion can become negative. It is found that middle-field approximation is insufficient to establish the type of the border of absolute instability.

Keywords: amorphous material, parameter of order, chemical potential, co-operation of phases, energy of Gibbs, curves of stability

Fig. 1. Surface describing dependence of by volume fraction of crystalline phase x_1 on temperature T and speed of heating q

Fig. 2. Evaluation of order parameter η at positive (a) and negative (b) energy of ordering W_2 and varied coefficients $k_1 = 0.25(a)$ and $-0.25(b)$; $k_2 = -0.55$ (1), 0.0 (2), 0.55 (3); the red line is function $y(z) = thz$

Fig. 3. Binodal (curve 1) and «diffusive» spinodal (curve 2) in the model of the middle field at $a = 2 \cdot 10^{-6}$

Fig. 4. The type of binodal at varied a : 1 – $2 \cdot 10^{-6}$; 2 – $9 \cdot 10^{-2}$; 3 – 0.3; 4 – 0.6; 5 – 15.0



53. Физика и техника высоких давлений.

Донецк, 2019, т. 29, № 4, с. 40-47

PACS: 61.43.Dq, 64.70.pe, 64.75.Nx , 81.10.Aj

Терехов С.В.

**ГРАНИЦЫ ТЕРМИЧЕСКОЙ УСТОЙЧИВОСТИ АМОРФНОГО
МАТЕРИАЛА. II. СУБРЕГУЛЯРНАЯ СОВОКУПНОСТЬ ФАЗ**

Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина

Статья поступила в редакцию 22 июля 2019 года

Показано, что поток параметра порядка зависит от значения эффективного коэффициента «диффузии» упорядочения. При постоянных внешних условиях он обращается в нуль при достижении условия локального равновесия, т.е. равенства химических потенциалов кристаллической и аморфной фаз. Другими словами, обращение в нуль первой производной от плотности энергии Гиббса приводит к установлению вида бинодали упорядочения. Обнуление второй производной дает выражение для «диффузионной» спинодали, а третьей производной – для истинной спинодали упорядочения. Показано, что симметрия и форма границ устойчивости аморфного материала существенно зависят от значений энергий упорядочения соответствующего уровня взаимного влияния локально-равновесных областей друг на друга.

Ключевые слова: аморфный материал, параметр порядка, химический потенциал, взаимодействие фаз, энергия Гиббса, кривые устойчивости

ВВЕДЕНИЕ

Аморфные сплавы представляют собой замороженные неравновесные системы с наличием лишь ближнего порядка в расположении частиц. С течением времени или ростом температуры происходит переход аморфного тела в кристалличе-

ское состояние, характерной чертой которого является возникновение дальнего порядка в размещении атомов. Изменение внутренней структуры сплава за счет выделения кристаллитов снижает уровень практической значимости изделий, изготовленных из неупорядоченных сред. Кроме того, с повышением температуры существенно изменяются свойства аморфных сплавов [1]. Поэтому знание границ термической стабильности таких систем представляет собой одну из актуальных задач материаловедения.

Рассмотрим двухфазную аморфную систему, состоящую из кристаллитов (объемная доля равна x_1) и неупорядоченной фазы (x_2). Целью данной работы является определение границ термической устойчивости аморфного материала по отношению к изменениям параметра порядка $\eta = x_1 - x_2$ при учете взаимного влияния друг на друга не более четырех локально-равновесных областей. Выбор параметра порядка η в качестве независимого аргумента обусловлен коллективной реакцией системы на течение времени или рост температуры. Правильность такого выбора была подтверждена сравнением теоретических результатов модели одного из авторов [2-4] с экспериментальными данными.

1. КОЭФФИЦИЕНТ ЭФФЕКТИВНОЙ ДИФФУЗИИ (КОЭФФИЦИЕНТ УПОРЯДОЧЕНИЯ)

Для описания состояния локально-равновесной области запишем плотность энергии Гиббса в виде

$$g = \mu_1 x_1 + \mu_2 x_2 = \mu_c + \mu_p \eta, \quad (1)$$

где величины $\mu_c = 0.5(\mu_1 + \mu_2)$, $\mu_p = 0.5(\mu_1 - \mu_2)$. При отклонении от равновесия изменения химических потенциалов μ_c и μ_p задаются формулами (см. также [5, с. 149, формула (5.48)])

$$d\mu_n = v_n dP - s_n dT \quad (n = c, p). \quad (2)$$

Здесь P – давление, T – абсолютная температура, v_n и s_n – соответственно объем и энтропия системы из расчета на один объект фазы. Следовательно, изменение функции (1) равно

$$\begin{aligned} dg &= d\mu_c + \eta d\mu_p + \mu_p d\eta = v_c dP - s_c dT + \eta(v_p dP - s_p dT) + \mu_p d\eta = \\ &= (v_c + \eta v_p) dP - (s_c + \eta s_p) dT + \mu_p d\eta = v_l dP - s_l dT + \mu_p d\eta. \end{aligned} \quad (3)$$

Из формулы (3) видно, что $\mu_p = (\partial g / \partial \eta)|_{P,T}$, т.е. обращение в нуль первой производной энергии Гиббса по параметру порядка η при постоянных значениях давления и температуры приводит к условию равновесия фаз $\mu_p = 0.5(\mu_1 - \mu_2) = 0 \Rightarrow \mu_1 = \mu_2$. Другими словами, условие $\mu_p = 0$ определяет границу абсолютной устойчивости системы, т.е. бинадаль упорядочения.

При тех же условиях ($P = const$, $T = const$) определим формулой Больцмана вероятность w того, что выделенная локальная область обладает энергией g ,

$$w = \exp\left(-\frac{g}{k_B T}\right). \quad (4)$$

По первому закону Фика и модели Онзагера [6], поток вероятности равен

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_w &= -L \nabla w = \frac{L}{k_B T} \exp\left(-\frac{g}{k_B T}\right) \nabla g = \frac{L}{k_B T} \exp\left(-\frac{g}{k_B T}\right) \left(\frac{\partial g}{\partial \eta}\right)_{P,T} \nabla \eta = \\ &= -D_{0eff} \exp\left(-\frac{g}{k_B T}\right) \nabla \eta = -D_{eff} \nabla \eta, \end{aligned} \quad (5)$$

где $L > 0$ – положительный кинетический коэффициент по модели Онзагера [6], $D_{0eff} = -\frac{L}{k_B T} \left(\frac{\partial g}{\partial \eta}\right)_{P,T} = \frac{L(\mu_2 - \mu_1)}{2k_B T}$ – предэкспоненциальный множитель, который при достижении локального равновесия обращается в нуль.

Первая производная от предэкспоненциального множителя по параметру порядка найдем по формуле

$$\frac{\partial D_{0eff}}{\partial \eta} = -\frac{L}{k_B T} \left(\frac{\partial^2 g}{\partial \eta^2}\right)_{P,T}. \quad (6)$$

Выполнение условия $(\partial^2 g / \partial \eta^2)|_{P,T} = 0$ определяет кривую экстремумов D_{0eff} , т.е. определяет линию, на которой коэффициент диффузии достигает минимального или максимального значения в зависимости от знака третьей производной от функции (1) по параметру порядка. Обращение в нуль этой производной порождает кривую устойчивости системы по отношению к случайным изменениям величины (4) [1, с. 207].

Таким образом, производные от энергии Гиббса (1) по параметру порядка определяют: 1) $\partial g / \partial \eta = 0$ – бинадаль упорядочения; 2) $\partial^2 g / \partial \eta^2 = 0$ – «диффузионную» спинодаль; 3) $\partial^3 g / \partial \eta^3 = 0$ – границу абсолютной неустойчивости. Найдем зависимости $T(\eta)$ для перечисленных вариантов.

2. СУБРЕГУЛЯРНОЕ СМЕШЕНИЕ ФАЗ

Учет взаимодействия не более четырех локально-равновесных областей с одинаковыми или различными фазовыми состояниями приводит к энергии Гиббса вида

$$g = W_0 + W_1\eta - \frac{W_2}{2}\eta^2 - \frac{W_3}{3}\eta^3 - \frac{W_4}{12}\eta^4 + \theta[(1+\eta)\ln(1+\eta) + (1-\eta)\ln(1-\eta)] \quad (7)$$

где W_i ($i = 0 - 4$) – энергии упорядочения при соответствующем уровне взаимодействия фаз, $\theta = k_B T$, k_B – постоянная Больцмана.

Вычислим первые три производных от функции (7) и приравняем их к нулю:

1) $\partial g / \partial \eta = 0$:

$$W_1 - W_2\eta - W_3\eta^2 - \frac{W_4\eta^3}{3} + \theta \ln\left(\frac{1+\eta}{1-\eta}\right) = 0; \quad (8)$$

2) $\partial^2 g / \partial \eta^2 = 0$:

$$-W_2 - 2W_3\eta - W_4\eta^2 + 2\theta/(1-\eta^2) = 0; \quad (9)$$

$$3) \partial^3 g / \partial \eta^3 = 0:$$

$$-W_3 - W_4\eta + 2\theta\eta/(1-\eta^2)^2 = 0. \quad (10)$$

1. Если функция (7) является четной (симметричной) функцией по параметру порядка η , то параметры $W_1 = W_3 = \dots = 0$. Тогда кривые устойчивости (8)-(10) описываются зависимостями:

– бинодаль упорядочения:

$$\tau = \frac{2\eta(1+e\eta^2)}{\ln\left(\frac{1+\eta}{1-\eta}\right)}, \quad (11)$$

где $\tau = 2\theta/W_2$ – приведенная температура, параметр $e = W_4/(3W_2)$;

– «диффузионная» спинодаль:

$$\tau = (1+3e\eta^2)(1-\eta^2); \quad (12)$$

– граница абсолютной неустойчивости:

$$\tau = 3e(1-\eta^2)^2 \text{ или } \eta = 0. \quad (13)$$

Из равенства (13) видно, что граница абсолютной неустойчивости существует только при положительных значениях параметра e .

На рис. 1 показаны графики приведенной температуры в зависимости от параметра порядка. Из рис. 1,а видно, что при слабом взаимодействии фаз границы устойчивости описываются симметричными кривыми относительно прямой $\eta=0$. Увеличение величины e приводит к (рис. 1,б):

– смещению максимума бинодали в сторону кристаллической фазы, т.е. к асимметрии кривой абсолютной устойчивости;

– возникновению лабильной площадки на границе относительной устойчивости, т.е. к сглаживанию пика «диффузионной» спинодали;

– возрастанию максимума кривой абсолютной неустойчивости.

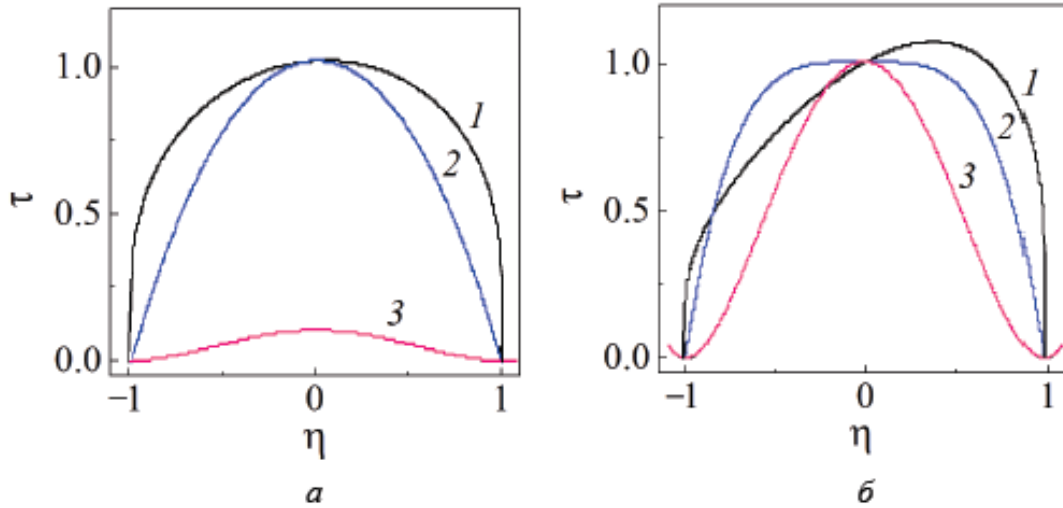


Рис. 1. Зависимости приведенной температуры τ от параметра порядка η при значениях параметра $\epsilon = 0.033$ (а) и $\epsilon = 0.334$ (б): 1 – бинадаль упорядочения, 2 – «диффузионная» спиноподаль, 3 – граница абсолютной неустойчивости

2. Функцию $f(\eta, a_{2i}, a_{2i+1})$ назовем квазичетной, если выполняется равенство

$$f(-\eta, a_{2i}, -a_{2i+1}) = f(\eta, a_{2i}, a_{2i+1}), \quad (14)$$

где a_{2i+1} – коэффициенты при нечетных степенях аргумента η . Это определение эквивалентно утверждению об инвариантности вида функции (7) при преобразовании зеркального отражения, т.е. при замене параметра порядка η на $-\eta$ и инверсии параметров при нечетных степенях аргумента функции (7) ($W_1 \rightarrow -W_1$ и $W_3 \rightarrow -W_3$). Кроме того, такое определение оставляет неизменным положение максимумов производных функции (7) при $\eta = 0$.

Будем считать, что коэффициенты при нечетных степенях параметра порядка η представимы в виде

$$\frac{W_1}{2k_B} = d_1 (T - W_2 / 2k_B), \quad \frac{W_3}{2k_B} = d_2 (T - W_2 / 2k_B), \quad (15)$$

т.е. замене η на $-\eta$ сопутствует изменение местами величин в круглых скобках (15).

Кривые устойчивости (8)-(10) описываются зависимостями:

– бинадаль упорядочения:

$$\tau = \frac{2f_1 + 2\eta(1 - f_2\eta + e\eta^2)}{f_1 - f_2\eta^2 + 0.5\ln\left(\frac{1+\eta}{1-\eta}\right)}, \quad (16)$$

здесь коэффициенты $f_1 = d_1/(2k_B)$ и $f_2 = d_2/(2k_B)$;

– «диффузионная» спинодаль:

$$\tau = \frac{(1 - 2f_2\eta + 3e\eta^2)(1 - \eta^2)}{1 - 2f_2\eta(1 - \eta^2)}; \quad (17)$$

– граница абсолютной неустойчивости:

$$\tau = \frac{(3e\eta - f_2)(1 - \eta^2)^2}{\eta - f_2(1 - \eta^2)^2}. \quad (18)$$

При значениях параметров $f_1 = 0$ и $f_2 = 0$ формулы (16)-(18) переходят в выражения (11)-(13). При больших значениях параметра f_1 , $f_2 = 0$ и малых значениях величины e бинадаль упорядочения вырождается в прямую параллельную оси параметра порядка η (рис. 2,а). Незначительное отклонение от нуля параметра f_2 вызывает нарушение непрерывности третьей производной от энергии Гиббса (7) даже при малых значениях параметров f_1 и e (рис. 2,б). Увеличение параметра e при неизменных параметрах $f_1 = 0.05$ и $f_2 = 0$ приводит к резкому возрастанию максимума границы абсолютной неустойчивости и появлению на бинадали упорядочения и «диффузионной» спинодали трех экстремумов: одного минимума в окрестности точки $\eta = 0$ и двух максимумов в аморфной и кристаллической областях (рис. 2,в).

Количество взаимодействий фаз определяет вид границ устойчивости сплава по отношению к конечным и бесконечно малым изменениям параметра порядка. Это количество задает не только форму бинадали и спинодали, но и изменяет кинетические характеристики процесса спонтанного изменения степени упорядочения. В зависимости от величины параметров, описывающих взаимодействие фаз, могут возникнуть разнообразные ситуации, например, возникновение кинетически не-

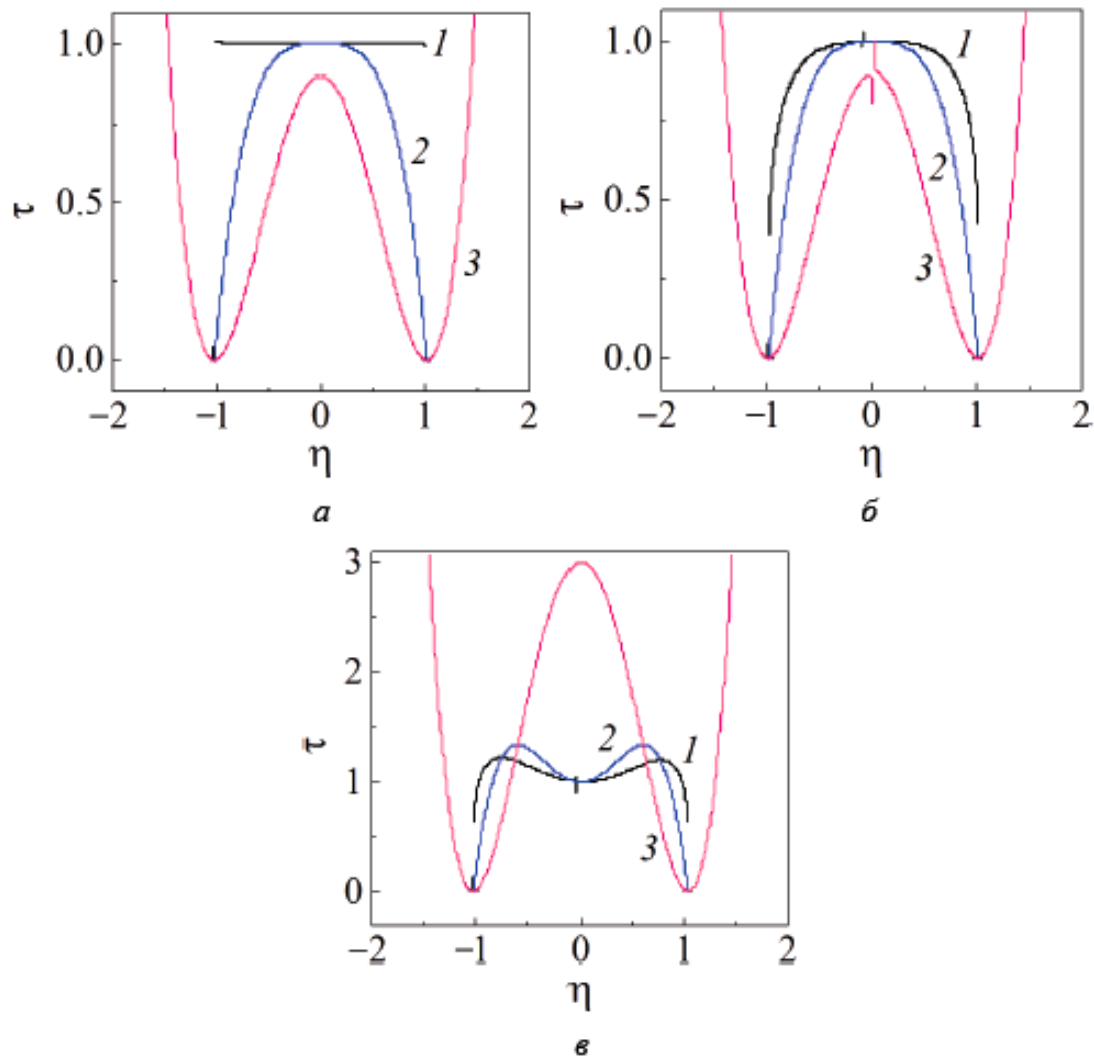


Рис. 2. Бинодаль упорядочения (1), «диффузионная» спинопаль (2) и граница абсолютной неустойчивости (3) при различных значениях модельных параметров: *а* – $f_1 = 200$, $f_2 = 0$, $e = 0.3$; *б* – $f_1 = 0.1$, $f_2 = 0.002$, $e = 0.3$; *в* – $f_1 = 0.05$, $f_2 = 0$, $e = 1.0$

устойчивых фаз, так как спинопаль может располагаться выше бинодали. Наличие таких эффектов в реальных материалах требует дополнительного экспериментального исследования.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Учет взаимодействий не менее четырех локально-равновесных областей с различными фазовыми состояниями приводит к описанию аморфного сплава в виде субрегулярной совокупности фаз. Выражения для расчета кривых устойчивости неупорядоченной среды получены из обращения в нуль пер-

вых трех производных от плотности энергии Гиббса двухфазного аморфного материала. Форма и симметрия построенных линий существенно зависит от значений энергий упорядочения при парном, тройном и четверном взаимодействии локально-равновесных областей. Несовпадение максимумов бинодали и спинодали упорядочения может приводить к появлению кинетически нестабильных фаз, а также трех экстремумов на кривых бинодали и «диффузионной» спинодали, т.е. к образованию в зоне абсолютной неустойчивости условно стабильной фазы. Это явление должно порождать целую серию кинетических процессов, для исследования которых требуется проведение новых экспериментов. Таким образом, термодинамический подход позволяет не только описать полученные экспериментальные данные, но и предсказывает существование новых явлений.

1. А.А. Щерецкий, В.Л. Лахненко, В.С. Шумихин, В.А. Соловьева, Электронная микроскопия и прочность материалов. Сб. научн. тр., ИПМ НАНУ, Киев (2010), с. 57-65.
2. С.В. Терехов, ФТВД **28**, № 1, 54 (2018).
3. С.В. Терехов, А.И. Лимановский, ФТВД **28**, № 3, 65 (2018).
4. С.В. Терехов, ФТВД **29**, № 2, 24 (2019).
5. С.В. Терехов, Моделирование тепловых и кинетических свойств реальных систем, Вебер. Донецк (2007).
6. L. Onsager, Phys. Rev., **37**, 405, **38**, 2265 (1931).

Terekhov S.V.

BOUNDARIES OF TERMAL STABILITY OF AN AMORPHOUS MATERIAL. II. SUBREGULAR POPULATION OF PHASES

It is shown that the flux of the order parameter depends on the value of the effective coefficient of ordering «diffusion». At per-

manent external conditions, the coefficient becomes zero upon reaching the condition of local equilibrium, i.e. equality of chemical potentials of the crystalline and amorphous phases. In other words, the vanishing first derivative of the density of Gibbs energy results in establishment of the type of the coexistence curve of ordering. Zero flexon and the third derivative determine «diffusive» spinodal and veritable ordering spinodal, respectively. It is shown that the symmetry and the form of boundaries of stability of an amorphous material substantially depend on the values of energies of ordering of the related level of cross-coupling of local equilibrium areas.

Keywords: amorphous alloy, order parameter, chemical potential, phase interaction, Gibbs energy, curves of stability

Fig. 1. Reduced temperature τ vs order parameter η at the values of parameter $e = 0.033$ (a) and $e = 0.334$ (b): 1 – coexistence curve of ordering; 2 – «diffusive» spinodal; 3 – boundary of absolute instability

Fig. 2. Coexistence curve of ordering (1), «diffusive» spinodal (2) and boundary of absolute instability (3) at the different values of model parameters: a – $f_1 = 200$, $f_2 = 0$, $e = 0.3$; б – $f_1 = 0.1$, $f_2 = -0.002$, $e = 0.3$; в – $f_1 = 0.05$, $f_2 = 0$, $e = 1.0$

54. Физика и техника высоких давлений.

Донецк, 2020, т. 30, № 1, с. 5-16

PACS: 61.43.Dq, 64.70.pe, 81.10.Aj

Терехов С.В.

**ТЕРМИЧЕСКИЕ ИЗМЕНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ
МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СТЕКОЛ**

Донецкий физико-технический институт им. А.А.Галкина

Статья поступила в редакцию

Исследовано влияние изменений температуры на состояние металлических стекол. Найдены полиномиальные аппроксимации температуры T_x и скорости кристаллизации v_x в зависимости от скорости нагрева образца q для аморфных сплавов $Fe_{40}Ni_{40}P_{14}B_6$ и $Fe_{40}Co_{40}P_{14}B_6$. Показано, что в случае второго сплава, для которого были рассчитаны объемная доля кристаллической фазы и скорости кристаллизации для диапазона скоростей нагрева от 5 до 200 K/min, зависимость v_x от $\ln q$ носит нелинейный характер в отличие от других характеристик. Продемонстрирована адекватность применяемой модели для описания моно- и мультистадийной кристаллизации. Проведен расчет температурных изменений объема образца при стекловании расплава и нагреве металлического стекла. Показано, что охлаждение расплава со сравнительно малыми (менее 0,05 K/min) или большими (более 1200 K/min) скоростями приводит к замене излома на указанной прямой на плавный переход от прямой переохлажденной жидкости к прямой стекла. Нагрев металлического стекла со скоростями более 500 K/min приводит к значительному расширению температурного интервала осуществления фазового перехода. Установлена связь плотности поверхностной энергии с температурой и объемной долей кристаллической фазы в ее зародыше.

Ключевые слова: металлическое стекло, фаза, объемная доля, скорость кристаллизации, энергия Гиббса, химический потенциал, температура

Введение

Металлические стекла получают, например, способом спиннингования жидкого расплава, без добавления или с добавлением в исходный состав шихты аморфизаторов (металлоидов В, С, Р, Si). Так добавка около 20 at. % этих элементов позволяет получать металлические стекла на основе железа: $\text{Fe}_{80}\text{V}_{20}$, $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{V}_6$, $\text{Fe}_{40}\text{Co}_{40}\text{P}_{14}\text{V}_6$, $\text{Fe}_{81}\text{V}_{13}\text{Si}_4\text{C}_2$, $\text{Fe}_5\text{Co}_{70}\text{Si}_{15}\text{V}_{10}$ и другие. Отметим, что сверхбыстрая закалка ($\sim 10^6$ К/с) вызывает изменение тепловых и других характеристик системы. Ближний порядок в расположении частиц в жидком расплаве, подвергаемом быстрому охлаждению, сохраняется в металлическом стекле, что отличает его от полностью неупорядоченного расположения атомов в аморфном сплаве. Обратный процесс нагрева металлического стекла приводит к зарождению и росту кристаллов.

В этой связи в работах [1-3] были развиты термодинамические и кинетические представления о сосуществовании двух фаз в исследуемом образце. В частности, были получены зависимости объемной доли $x_1(T, q)$ фазы 1 от температуры T (К) и скорости внешнего воздействия q (К/мин)

$$x_1(T, q) = \frac{1}{2} \left[1 - \text{th} \left(a(q) \left\{ 1 - \frac{T_x(q)}{T} \right\} \right) \right], \quad (1)$$

где $x_1(T, q) = V_1(T)/V(T)$, $V_1(T)$ – объем фазы 1, $V(T)$ – объем образца,

$$a(q) = -2 \cdot T_x(q) \cdot v_x(q) \quad (2)$$

– параметр модели [1], определяющий количество теплоты ΔQ , выделяемое образцом в стандартных условиях при изменении его температуры на величину ΔT , $T_x(q)$ – температура, при которой наблюдается максимум скорости изменения объемной доли $v_x(q) = dx_1 / dT$.

При температурах выше равновесной температуры плавления T_m объем жидкого расплава в процессе охлаждения уменьшается по известному закону (см., напр., [4, с.13])

$$V(T) = V_0[1 + \alpha(T - T_0)], \quad (3)$$

где $V_0 = V(T_0)$ – объем расплава при температуре T_0 , α – коэффициент объемного расширения системы. Кристаллизация расплава при атмосферном давлении и комнатной температуре сопровождается тем фактом, что при достижении температуры плавления T_m объем системы скачком уменьшается до значения объема кристаллической фазы. Дополнительное внешнее охлаждение расплава приводит к возникновению состояния переохлажденной жидкости, температурный интервал существования которой находится ниже T_m . При достижении температуры стеклования T_g на прямой, построенной по формуле (3), наблюдается точка излома [5, с.75, рис. 2.16], после которой прямая изменяет свой угол наклона к температурной оси. Если скорость стеклования мала, то вместо излома наблюдается плавный переход от указанной прямой к прямой изменения объема стекла. Следовательно, в метастабильном состоянии коэффициент объемного расширения α системы, содержащей две или более фаз, зависит от температуры и фазового состава.

Целью данной работы является теоретическое исследование температурных изменений ряда параметров и характеристик состояния двухфазной системы: параметров образца и его теоретической модели; моно- и мультстадийности процесса кристаллизации; объема $V(T)$; температуры поверхности раздела упорядоченной и материнской фаз.

1. Параметры теоретической модели для металлических стекол $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$ и $\text{Fe}_{40}\text{Co}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$

Предложенная в [1] простейшая термодинамическая модель «размытых» фазовых переходов проверялась на массивах экспериментальных данных [6-8], полученных при исследовании металлических стекол $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$ и $\text{Fe}_{40}\text{Co}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$.

Экспериментальные значения точки, в которой наблюдается максимальная скорость кристаллизации образца $v_x(q) = dx_1/dT$ при температуре T_x , были аппроксимированы полиномами (рис. 1):

$$\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6: T_x = 664.7 + 13 \cdot z; \quad v_x = 0.167 - 0.028 \cdot z;$$

$$\text{Fe}_{40}\text{Co}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6: T_x = 725.7 + 9.3 \cdot z; \quad v_x = 0.373 - 0.058 \cdot z^2 + 0.025 \cdot z^3 - 0.008 \cdot z^4 + 0.001 \cdot z^5,$$

где аргумент z связан со скоростью нагрева образца соотношением $z = \ln q - 1.9$. Из рис. 1 видно, что представленные сплавы существенно разнятся характером изменения величин $v_x(q)$ при увеличении скорости q . Это связано с заменой атомов никеля на атомы кобальта, которые не только имеют бóльший объем [9, с.70], но и отличаются электронными свойствами, которые подвержены температурным изменениям, оказывающим влияние на термическую устойчивость металлического стекла.

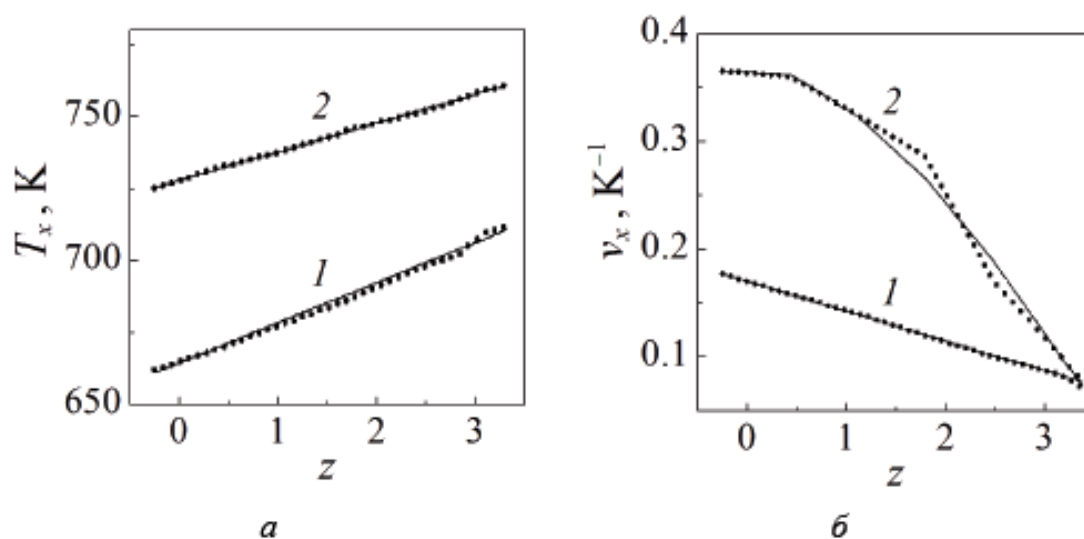


Рис. 1. Зависимости температуры T_x (а) и максимальной скорости кристаллизации v_x (б) от скорости нагрева q ($z = \ln q - 1.9$) для образцов неупорядоченных сплавов $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$ (кривые 1) и $\text{Fe}_{40}\text{Co}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$ (кривые 2): точки – эксперимент, сплошные линии – аппроксимация

Такой же нелинейный характер для сплава $\text{Fe}_{40}\text{Co}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$ демонстрирует зависимость теоретического параметра $a(q)$, который вычислялся по формуле (2) и экспериментальным значениям $T_x(q)$ и $v_x(q)$. Для указанных металлических стекол параметры модели были аппроксимированы функциями:

$$\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6: a(q) = 221.6 - 36 \cdot z;$$

$$\text{Fe}_{40}\text{Co}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6: a(q) = 536.0 - 55.0 \cdot z^2 + 35.0 \cdot z^3 - 20.0 \cdot z^4 + 3.3 \cdot z^5.$$

2. Объемная доля кристаллической фазы $x_1(T, q)$ и скорость кристаллизации $v_x(T, q)$

Установленные аппроксимации параметров теоретической модели позволяют вычислить объемную долю кристаллической фазы $x_1(T, q)$ (формула (1)) и скорость кристаллизации $v_x(T, q)$ при произвольных значениях величины q . На рис. 2 показаны температурные кривые для этих характеристик металлического стекла $\text{Fe}_{40}\text{Co}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$ при различных скоростях нагрева образца (аналогичные данные для сплава $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$ приведены в работе [1, с.57, рис. 1]).

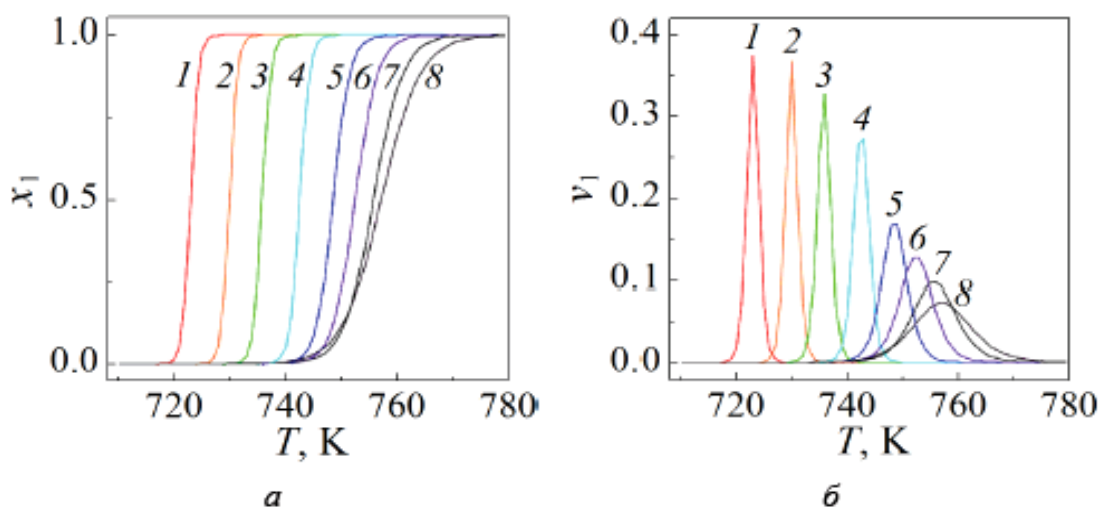


Рис. 2. Температурные зависимости объемной доли x_1 (а) и ее первой производной v_1 (б) для кристаллической фазы в аморфном сплаве $\text{Fe}_{40}\text{Co}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$ при различных скоростях нагрева образца q , K/min: 1 – 5, 2 – 10, 3 – 20, 4 – 40, 5 – 80, 6 – 120, 7 – 160, 8 – 200

Из рис. 2 видно, что увеличение скорости нагрева образца металлического стекла приводит к уширению температурного интервала кристаллизации, уменьшению максимума скорости кристаллизации и вытягиванию ее графика вдоль температурной оси, так как площадь под кривой должна всегда равняться единице в силу того, что предельное значение объемной доли кристаллической фазы равно 1.

3. Мультистадийная кристаллизация металлических стекол

Кристаллизация металлических стекол сопровождается не только выделением теплоты фазового перехода, но и другими перекрестными кинетическими процессами с тепловыми эффектами [10] (термодиффузия, экзотермические химические реакции, изменения структуры и состава материнской фазы в окрестности растущего зародыша, рост кристаллитов разной химической природы и т.д.).

Эти феномены проявляются как на графике зависимости $x_1(T)$ в виде наклона горизонтальных участков («ступеней») или их отсутствия, так и на экспериментальных кривых, полученных методом дифференциально-сканирующей калориметрии (ДСК), в виде наложения пиков выделенной теплоты при протекании различных конкурирующих между собой процессов, асимметрии пиков или ненулевого фона термограммы. В этой связи затруднительно определять по термограмме не только количество кристаллических фаз, но и число стадий процесса кристаллизации аморфного сплава.

Предположим, что теплота H_k , выделяющаяся в процессе изменения параметра порядка, пропорциональна скорости $v_k = dx_k / dT$ процесса k

$$H_k = A_k v_k, \quad (4)$$

здесь A_k – коэффициенты пропорциональности. Выполнив нормировку суммарного теплового эффекта на величину $A = \sum_k A_k$,

получим выражение

$$v = \sum_k c_k v_k, \quad (5)$$

($v = \sum_k H_k / A$, $c_k = A_k / A$) которое после интегрирования по аргументу T позволяет вычислять объемные доли не только отдельных кристаллических фаз, но и объемные доли областей с

изменяющимися параметрами порядка в целом. Представление процесса кристаллизации в виде линейного набора процессов, изменяющих параметр порядка, позволяет описать его мультистадийность в металлических стеклах $\text{Fe}_{85}\text{V}_{15}$ [11] (рис. 3) и $\text{Al}_{86}\text{Ni}_6\text{Co}_2\text{Gd}_6$ [12] (рис. 4).

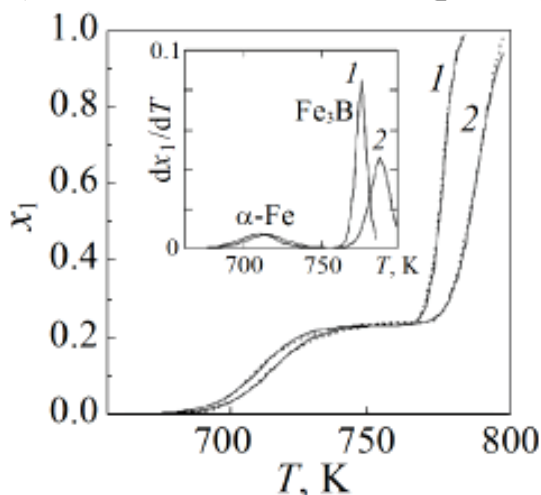


Рис. 3. Зависимость объемной доли кристаллической фазы (на вставке – изменение ее первой производной) от температуры в аморфном сплаве $\text{Fe}_{85}\text{V}_{15}$ при скоростях нагрева образца $q = 10$ (1) и 40 (2) K/min (сплошные кривые – теория, штриховые – эксперимент)

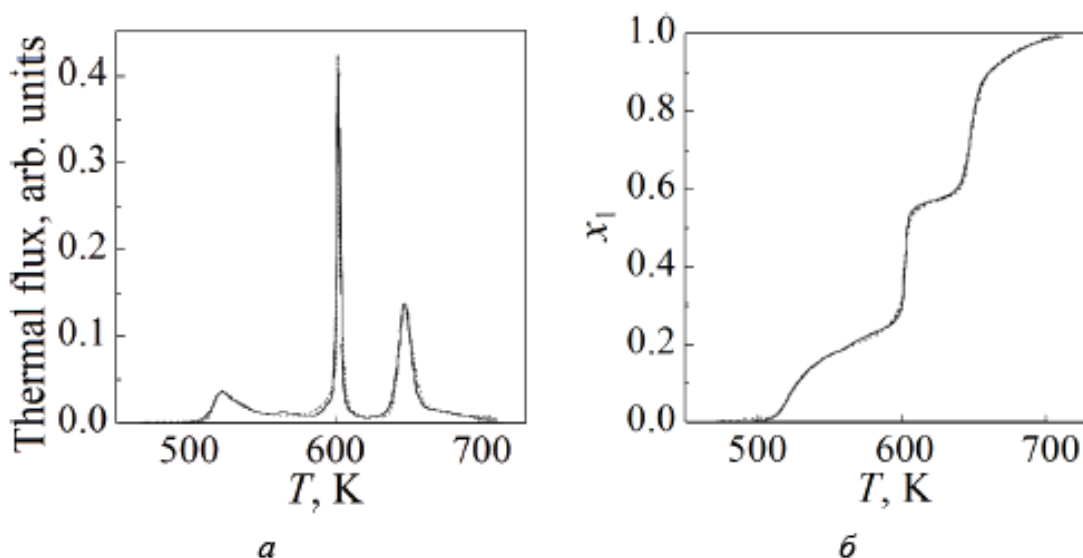


Рис. 4. Тепловой поток, измеренный с помощью ДСК (а), и график изменения объемной доли кристаллической фазы (б) в металлическом стекле $\text{Al}_{86}\text{Ni}_6\text{Co}_2\text{Gd}_6$ при скорости нагрева $q = 10$ K/min (сплошные кривые – теория, штриховые – эксперимент)

Сплав $\text{Fe}_{85}\text{V}_{15}$. В работе [11] установлено, что кристаллизация в металлическом стекле $\text{Fe}_{85}\text{V}_{15}$ происходит в две стадии: вначале растут кристаллы $\alpha\text{-Fe}$ (фаза α), а затем – Fe_3V (фаза β). Теоретические расчеты проводили по формулам (1) и (6) для каждого типа кристаллов:

$$x = c_1 x_{1(\alpha)} + c_2 x_{1(\beta)}, \quad (6)$$

где константы $c_1 = 0.23$ и $c_2 = 0.77$ не зависят от скорости нагрева образца q . Параметры уравнения (1) при соответствующих скоростях нагрева равны

$$q = 10 \text{ K/min: } a_{(\alpha)} = -0,055, \quad T_{(\alpha)} = 689 \text{ K}, \quad a_{(\beta)} = -0,19, \quad T_{(\beta)} = 768 \text{ K};$$

$$q = 40 \text{ K/min: } a_{(\alpha)} = -0,06, \quad T_{(\alpha)} = 715 \text{ K}, \quad a_{(\beta)} = -0,12, \quad T_{(\beta)} = 790 \text{ K}.$$

На рис. 3 представлены результаты теоретического расчета (сплошные линии) и экспериментальные данные [11] (штриховые линии) двустадийной кристаллизации металлического стекла $\text{Fe}_{85}\text{B}_{15}$. На вставке рис. 3 показаны скорости кристаллизации металлического стекла при различных скоростях нагрева образца q .

Сплав $\text{Al}_{86}\text{Ni}_6\text{Co}_2\text{Gd}_6$. Нахождение вида кинетической кривой кристаллизации проводили путем расчета ДСК-термограммы, используя формулы (1) и (6) с учетом иных возможных тепловых эффектов. Для достаточно близкого описания термограммы было использовано ее разложение на 7 симметричных пиков вида производной по температуре от (1). Коэффициенты A_k равны $A_1 = 0,27$, $A_2 = 0,59$, $A_3 = 0,43$, $A_4 = 0,51$, $A_5 = 1,18$, $A_6 = 1,37$, $A_7 = 1,02$, а параметры уравнений вида (1) – $a_{(1)} = -0,16$, $T_{(1)} = 520 \text{ K}$, $a_{(2)} = -0,07$, $T_{(2)} = 530 \text{ K}$, $a_{(3)} = -0,05$, $T_{(3)} = 565 \text{ K}$, $a_{(4)} = -0,11$, $T_{(4)} = 600,6 \text{ K}$, $a_{(5)} = -0,64$, $T_{(5)} = 602 \text{ K}$, $a_{(6)} = -0,18$, $T_{(6)} = 648 \text{ K}$, $a_{(7)} = -0,03$, $T_{(7)} = 662 \text{ K}$. При этом объемную долю кристаллической фазы вычисляли по формуле

$$x_1(T) = \sum_{k=1}^7 c_k x_{1k}, \quad (7)$$

где константы $c_1 = 0.05$, $c_2 = 0.11$, $c_3 = 0.08$, $c_4 = 0.095$, $c_5 = 0.22$, $c_6 = 0.255$, $c_7 = 0.19$. Результат расчета термограммы ДСК представлен на рис. 4,а.

Мультистадийная кристаллизация металлического стекла $\text{Al}_{86}\text{Ni}_6\text{Co}_2\text{Gd}_6$ [12] показана на рис. 4,б в виде зависимости объемной доли упорядоченной фазы от температуры. Из ри-

сунка видно, что «ступеньки» являются наклонными, что свидетельствует о взаимном влиянии кристаллизующихся фаз друг на друга, а также о перекрытии пиков упорядочения на ДСК-термограмме. Отклонение участков между «ступеньками» от вертикальности указывает на «размытость» фазовых переходов и недостаточно большую скорость нагрева образца.

4. Температурные изменения объема образца

Многолетние исследования теплового расширения металлических стекол (см., напр., [13, 14]) показали, что значения их коэффициентов α в формуле (3) для различных агрегатных состояний близки по величине. С целью изучения охлаждения жидкого расплава и возникновения метастабильного состояния с наличием только ближнего порядка рассмотрим модельную систему со следующими коэффициентами расширения фаз: $\alpha_1 = 3.571 \cdot 10^{-5}$ – жидкий расплав; $\alpha_2 = 2.000 \cdot 10^{-6}$ – металлическое стекло; $\alpha_3 = 3.333 \cdot 10^{-6}$ – кристалл. Наличие фазовых переходов 1–2 или 1–3 определяется скоростью охлаждения расплава и изменяет коэффициент теплового расширения системы. Предположим, что он зависит от объемных долей фаз и задается формулой

$$\alpha(T, q) = \alpha_1 \cdot x_1(T, q) + \alpha_{2(3)} \cdot (1 - x_1(T, q)). \quad (8)$$

Вычисления проводились по формуле типа (3) с учетом (8)

$$V(T)/V_0 = k(T_g)[1 + \alpha(T, q) \cdot (T - T_g(q))]. \quad (9)$$

Параметры теоретической модели представлены в таблице, а результаты расчета – на рис. 5.

Из рис. 5, I видно, что скорость охлаждения оказывает влияние на величину температуры стеклования: чем выше скорость охлаждения, тем выше температура стеклования. При очень малых (менее 0,05 K/min) и очень больших (более 1200 K/min) скоростях охлаждения переход от прямой жидкого расплава к прямой стекла осуществляется по плавной кривой, а в остальных случаях наблюдается излом.

Таблица

**Величины для вычисления значений объема металлического стекла
в зависимости от температуры при охлаждении расплава T_g
и при нагреве образца T_c**

№ п/п	$q, \text{K/min}$	T_g	T_x	v_g	v_x	$-a(q) \cdot 10^{-3}$ (расплав)	$-a(q)$ (образец)	$k(T_g)$	$k(T_c)$
		К		K^{-1}					
1*	0.099488	610.0		2.110	0.285	2.574	347.231	0.99800	1.00000
2	5	660.9		2.000	0.200	2.644	264.368	1.00000	
3	200	708.9		1.897	0.020	2.689	28.355	1.00150	
4	2500	741.7	746.7	1.826	0.004	2.709	5.974	1.00267	

Примечание. 1* – «идеальное» состояние.

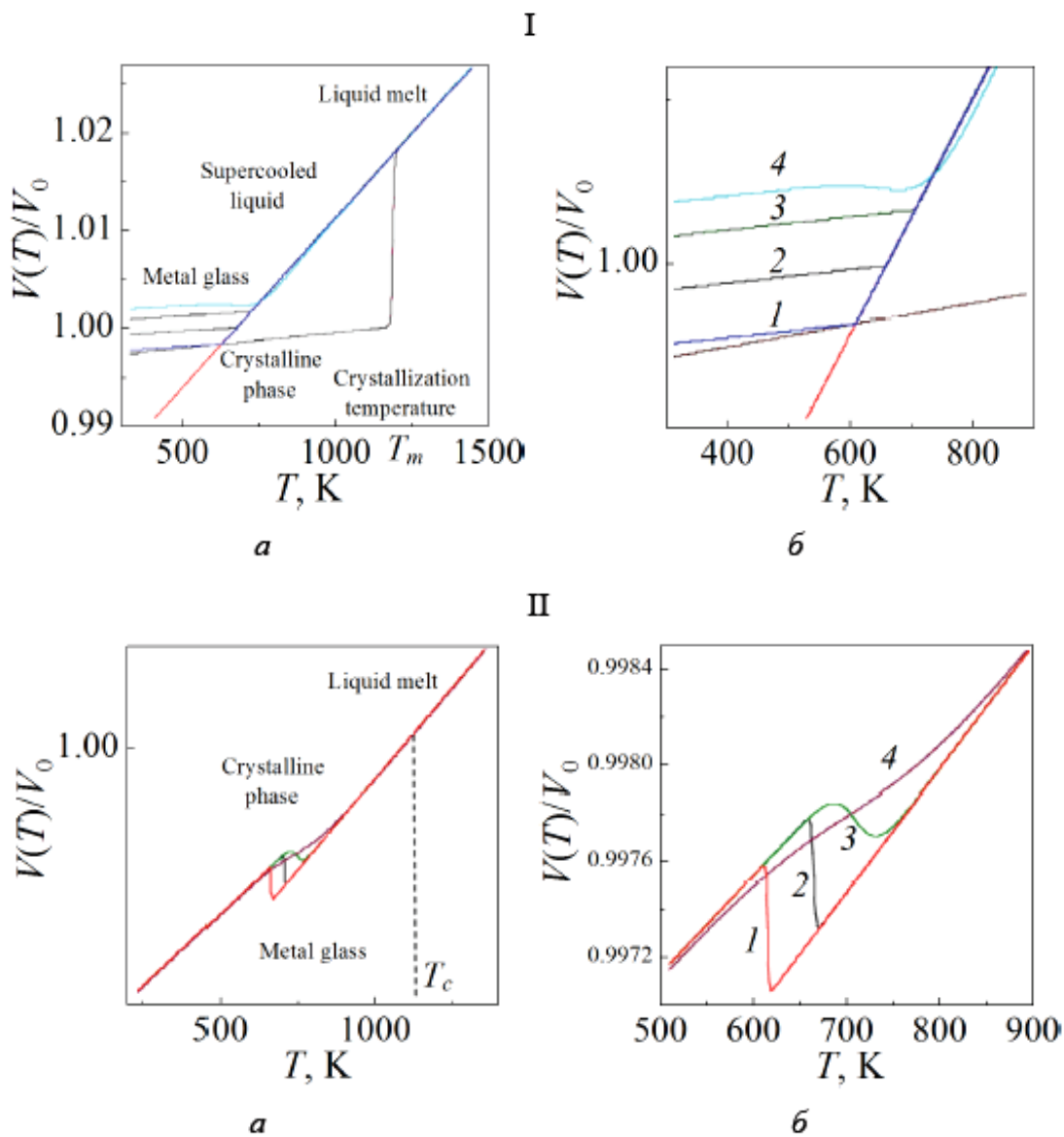


Рис. 5. Температурные изменения объема металлического стекла (а) и увеличение области стеклования (б) при скорости охлаждения (I) и нагрева (II) $q, \text{K/min}$: 1 – ≈ 0.1 , 2 – 5, 3 – 200, 4 – 2500

Нагрев образца металлического стекла вызывает зарождение и рост кристаллитов [6-8, 11, 12]. Для изучения влияния скорости нагрева q на температурные изменения объема образца рассмотрим модельную двухфазную систему с коэффициентами расширения: $\alpha_1 = 5.0 \cdot 10^{-6}$ – кристаллиты с предельной температурой существования упорядоченной фазы $T_c = 1180$ К; $\alpha_2 = 4.0 \cdot 10^{-6}$ – металлическое стекло. Коэффициент теплового расширения системы определим формулой (8), а температурную зависимость объема образца –

$$V(T)/V_0 = k(T_c)[1 + \alpha(T, q)(T - T_c)]. \quad (10)$$

Параметры модели показаны в таблице, а результаты расчета – на рис. 5,II.

Как видно из рис. 5,II, вхождение системы в двухфазную область вызывает скачкообразное изменение объема системы за счет упорядочения ее частиц и уменьшения свободного объема. Кроме того, значительное (более 500 К/min) увеличение скорости нагрева приводит к расширению температурного интервала осуществления фазового перехода.

4. Температура границы раздела фаз и плотность поверхностной энергии

Для определения температуры границы раздела фаз в металлических стеклах рассмотрим разность энергий Гиббса сферического зародыша кристаллической (фаза 1) и материнской фаз (фаза 2) в одном моле вещества, содержащем один кристаллит. Для фазы i введены обозначения: μ_i – химический потенциал, x_i – объемная доля, σ_i – плотность поверхностной энергии, S_i – площадь межфазной границы. Тогда энергии Гиббса единичного объема кристаллической фазы

$$G_1 = \mu_1 x_1 + \sigma_1 S_1, \quad (11)$$

и окружающей ее матрицы

$$G_2 = \mu_2 x_2 + \sigma_2 S_2. \quad (12)$$

Разность величин (11) и (12) задается формулой

$$\Delta G = G_1 - G_2 = \mu_1 x_1 + \sigma_1 S_1 - (\mu_2 x_2 + \sigma_2 S_2) = x_1(\mu_1 - \mu_2) + S_1(\sigma_1 - \sigma_2) + \mu_2(x_1 - x_2) + \sigma_2(S_1 - S_2) = x_1 \Delta \mu + S_1 \Delta \sigma + \Delta g, \quad (13)$$

где $\Delta \mu = \mu_1 - \mu_2$ – химический потенциал зародыша, $\Delta \sigma = \sigma_1 - \sigma_2$ – его поверхностная энергия, а величина $\Delta g = \mu_2(x_1 - x_2) + \sigma_2(S_1 - S_2)$ описывает обмен энергией Гиббса зародыша с окружающей средой. Используя работу [1], запишем изменение химического потенциала в виде

$$\Delta \mu = \mu_1 - \mu_2 = \mu_{10} - \mu_{20} + \theta \ln \left(\frac{x_1}{1-x_1} \right) = g_1 + \theta \ln \left(\frac{x_1}{1-x_1} \right). \quad (14)$$

Пренебрегая обменом зародыша с матрицей и учитывая равенство (12), получим

$$\Delta G = x_1 g_1 + \theta x_1 \ln \left(\frac{x_1}{1-x_1} \right) + S_1 \Delta \sigma, \quad (15)$$

здесь

$$x_1 = \Omega_1 / \Omega_M = 4\pi r^3 / (3\Omega_M), \quad (16)$$

r – радиус зародыша, Ω_M – мольный объем вещества.

Предположим, что плотность поверхностной энергии $\Delta \sigma$ не зависит от радиуса r сферического зародыша. Найдем первую производную от ΔG по радиусу r и приравняем её нулю при критическом значении r_c :

$$\left. \frac{\partial(\Delta G)}{\partial r} \right|_{r=r_c} = \frac{4\pi r^2}{\Omega_M} \left(\Delta \mu + \frac{\theta}{1-x_1} \right) + 8\pi r \Delta \sigma \Big|_{r=r_c} = 0. \quad (17)$$

Уравнение (17) для нахождения критического значения радиуса r_c сферического зародыша является нелинейным, так как объемная доля x_1 зависит от r_c . Поэтому домножим (17) на величину $\Omega_M / (4\pi L \theta)$ (L – характерная длина) и обозначим безразмерный радиус зародыша через $r_c^* = r_c / L$. Тогда (17) примет вид

$$r_c^* \left(\frac{\Delta \mu(r_c^*)}{\theta} + \frac{1}{1-x_1(r_c^*)} \right) + \frac{T_\sigma}{T} = 0$$

или с учетом (14)

$$r_c^* \left(\frac{g_1}{\theta} + \ln \left(\frac{x_1(r_c^*)}{1-x_1(r_c^*)} \right) + \frac{1}{1-x_1(r_c^*)} \right) + \frac{T_\sigma}{T} = 0. \quad (18)$$

Характеристика $T_\sigma = 2 \cdot \Omega_M \Delta\sigma / (k_B L)$ имеет размерность температуры и связана с плотностью поверхностной энергии, поэтому ее можно назвать *температурой границы раздела фаз*. Учитывая разложение теоретического параметра g_1 по температуре (см. [1]), а также формулы (2) и (16), получим окончательное выражение для температуры границы раздела фаз

$$T_\sigma = -T \sqrt[3]{\gamma x_1(r_c^*)} \left(-4T_x(q) v_x(q) \left\{ 1 - \frac{T_x(q)}{T} \right\} + \ln \left(\frac{x_1(r_c^*)}{1-x_1(r_c^*)} \right) + \frac{1}{1-x_1(r_c^*)} \right), \quad (19)$$

где коэффициент $\gamma = 3\Omega_M / (4\pi L^3)$. При температуре $T = T_x(q)$ и объемной доле кристаллической фазы $x_1(r_c^*) = 0,5$ из (19) следует, что температура $T_\sigma = -\sqrt[3]{4\gamma} T_x(q)$, т.е. плотность поверхностной энергии $\Delta\sigma \approx -0,721\theta_x(q) / \Omega_M^{2/3}$.

Выводы

1. Предложенная термодинамическая модель качественно и количественно верно описывает экспериментальные массивы данных по кристаллизации в металлических стеклах при изменении температуры как в случае моно-, так и мультстадийного процессов.

2. Для металлических стекол $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$ и $\text{Fe}_{40}\text{Co}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$ установлены аппроксимационные зависимости параметров процесса кристаллизации от скорости нагрева образца q , позволяющие рассчитывать объемные доли кристаллических фаз и скорости кристаллизации при произвольных значениях величины q в пределах от 5 до 200 К/мин.

3. Для моностадийной кристаллизации неупорядоченных образцов характерны S-образные кривые логистического типа. Многоступенчатые кривые для объемной доли кристал-

лической фазы описывают мультистадийную кристаллизацию. Это означает, что кристаллическая фаза приобретает новые степени свободы для варьирования своим фазовым составом.

4. Протекание в металлическом стекле помимо процесса кристаллизации других кинетических процессов может приводить к появлению кристаллов-сателлитов и, как следствие, к перекрытию пиков на термограмме ДСК, их асимметрии, наклону горизонтальных участков на кривых, описывающих объемную долю кристаллической фазы, а также затруднять определение стадийности процесса кристаллизации.

5. Предложенная модель может использоваться для расчетов скоростей кристаллизации по ДСК-термограмме, прогноза температурных изменений объемной доли кристаллической фазы и т.д.

1. *С.В. Терехов*, ФТВД **28**, № 1, 54 (2018).
2. *С.В. Терехов, А.И. Лимановский*, ФТВД **28**, № 3, 65 (2018).
3. *С.В. Терехов*, ФТВД **29**, № 2, 24 (2019).
4. *П.Ф. Коротков*, Молекулярная физика и термодинамика. Основные положения и решения задач, МФТИ, Москва (2004).
5. *А. Фельц*, Аморфные и стеклообразные неорганические твердые тела, Мир, Москва (1986).
6. *V.I. Tkatch, A.I. Limanovskii, V.Yu. Kameneva*, Journal of materials science **32**, 5669, (1997).
7. *В.И. Ткач, В.В. Попов, С.Г. Рассолов*, Металлофизика и новейшие технологии **31**, 1271 (2009).
8. *S.V. Vasiliev, O.V. Kovalenko, K.A. Svyrydova, A.I. Limanovskii, V.I. Tkatch*, J. Mater. Sci. **54**, 5788 (2019).
9. *Б.К. Вайнштейн, В.М. Фридкин, В.Л. Инденбом*, Современная кристаллография. Т. 2. Структура кристаллов, С.А. Семилетов (ред.), Наука, Москва (1979).
10. *С.В. Терехов*, Моделирование тепловых и кинетических свойств реальных систем, Вебер, Донецк (2007).

11. В.И. Ткач, С.Г. Рассолов, Т.Н. Мусеева, В.В. Попов, ФММ **104**, 497 (2007).
12. С.Г. Рассолов, Е.А. Свиридова, В.В. Максимов, В.К. Носенко, И.В. Жихарев, Д.В. Матвеев, Е.А. Першина, В.И. Ткач, Металлофиз. новейшие технологии **37**, 1089 (2015).
13. В.Н. Новиков, Е.И. Харьков, ФММ **54**, 1210 (1982).
14. N. Nishiyama, M. Horino, A. Inoue, Materials Transactions, **41**, 1432 (2000).

S.V. Terekhov

THERMAL CHANGES IN THE STATE OF METAL GLASSES

The influence of temperature changes on the state of metal glasses is investigated. Polynomial approximations of temperature T_x and crystallization rate v_x depending on sample heating rate q for amorphous alloys $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$ and $\text{Fe}_{40}\text{Co}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$ are found. It is shown that in the case of the second alloy, for which the volume fraction of the crystal phase and the crystallization rate were calculated for the heating rate range from 5 to 200 K/min, the dependence of v_x on $\ln(q)$ is nonlinear in contrast to other characteristics. The adequacy of the applied model for the description of mono- and multistage crystallization is demonstrated. The calculation of temperature changes in the sample volume during melt vitrification and heating of metal glass is carried out. It is shown that the cooling of the melt with relatively small (less than 0,05 K/min) or large (more than 1200 K/min) velocities leads to the replacement of the fracture on the said straight line by a smooth transition from the supercooled liquid straight line to the glass straight line. Heating of metal glass at speeds greater than 500 K/min leads to a significant expansion of the temperature range of the phase transition. The connection of the surface energy density with the temperature and volume fraction of the crystalline phase in its embryo is established.

Keywords: metal glasse, phase, volume fraction, crystallization rate, Gibbs energy, chemical potential, temperature

Fig. 1. Dependences of temperature T_x (a) and the maximum crystallization rate v_x (b) on the heating rate q ($z = \ln q - 1.9$) for the samples of disordered alloys $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$ (curves 1) and $\text{Fe}_{40}\text{Co}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$ (curves 2): points – experiment, solid lines – approximation

Fig. 2. Temperature dependences of the volume fraction x_1 (a) and the first derivative v_1 (b) for the crystalline phase in the $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$ amorphous alloy at varied heating rate q , K/min: 1 – 5, 2 – 10, 3 – 20, 4 – 40, 5 – 80, 6 – 120, 7 – 160, 8 – 200

Fig. 3. Temperature dependence of the volume fraction of crystalline phase (the first derivative on the inset) in the $\text{Fe}_{85}\text{B}_{15}$ amorphous alloy at the heating rate $q = 10$ (1) and 40 (2) K/min (solid lines – theory, dashed ones – experiment)

Fig. 4. Thermal flux measured by DSC (a), and chart of change of the volume fraction of crystalline phase (b) in the $\text{Al}_{86}\text{Ni}_6\text{Co}_2\text{Gd}_6$ metal glass at the heating rate $q = 10$ K/min (solid lines – theory, dashed ones – experiment)

Fig. 5. Temperature dependences of the volume of metal glass (a) and increase of area of glass transition (b) at the rate of cooling (I) and heating (II) q , K/min: 1 – ≈ 0.1 , 2 – 5, 3 – 200, 4 – 2500

БЛАГОДАРНОСТИ

Автор безмерно благодарен всем тем, кто помогал ему в поисках научной истины и росту его понимания физической сути окружающего мира. Ограниченность объема издания не позволяет перечислить всех соавторов (д.ф.-м.н. Захаров А.Ю., д.ф.-м.н. Варюхин В.Н., д.ф.-м.н. Юрченко В.М., д.ф.-м.н. Ткач В.И., к.ф.-м.н. Лимановский А.И., ст. преп. Локтионов И.А. и многие другие), рецензентов и сотрудников редколлегии журналов, публиковавших мои работы. Я также искренне признателен всем рецензентам и сотрудникам редколлегии журнала «Физика и техника высоких давлений» (зав. ред. Фомина С.С.), издаваемого Донецким физико-техническим институтом им. А.А. Галкина за улучшение изложения моих произведений в журнале ФТВД. Вашу помощь невозможно оценить: БЛАГОДАРЮ ВСЕХ.

Обложки книг



Донецк: Изд-во ДонНУ, 2016. – 348 с.

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
ДОНЕЦКОЙ НАРОДНОЙ РЕСПУБЛИКИ
ДОНЕЦКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ
ДОНЕЦКИЙ ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ
ИНСТИТУТ ИМ. А. А. ГАЛКИНА

С. В. Терехов,

В. Н. Варюхин,

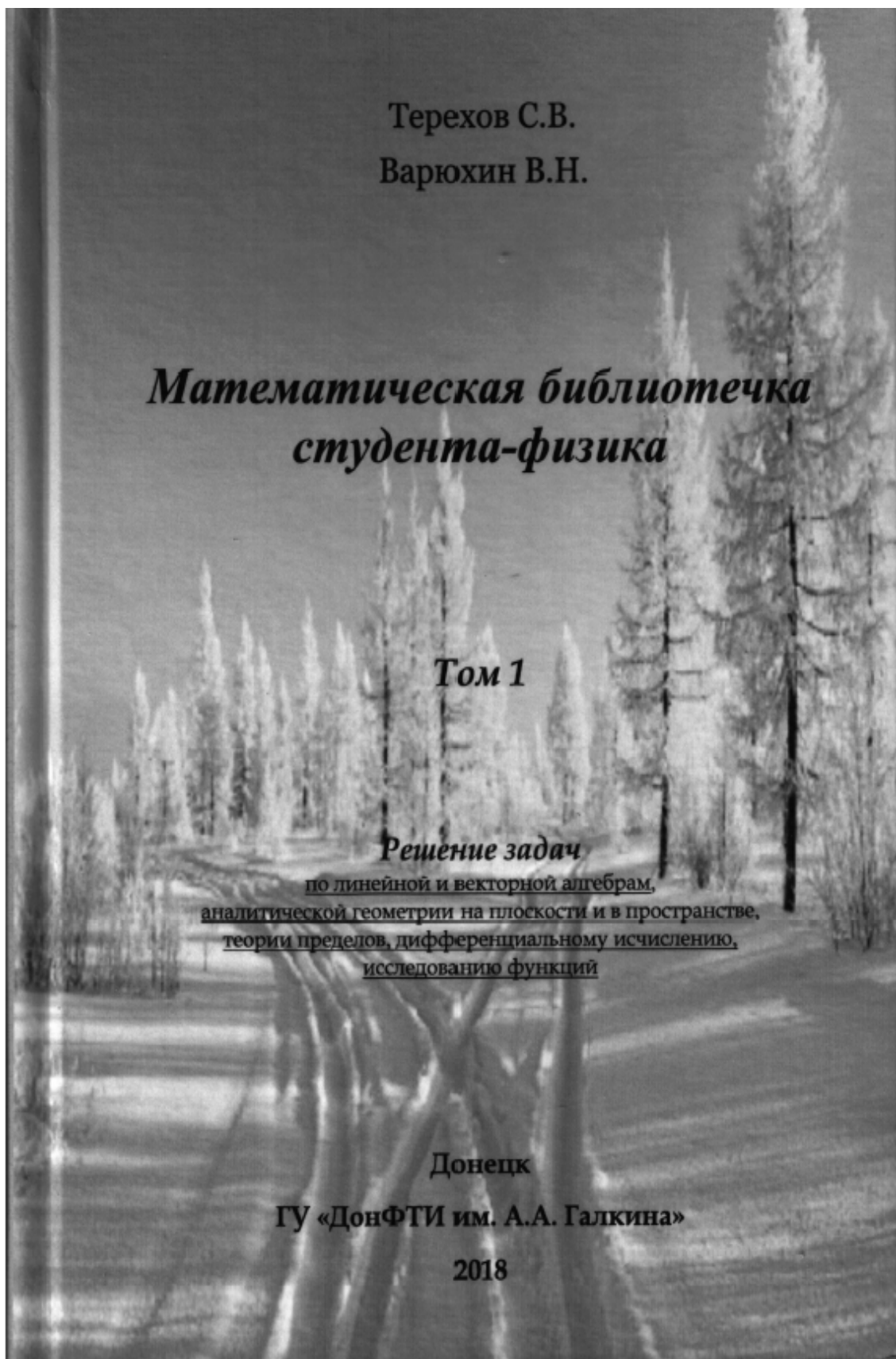
В. М. Юрченко

НАНОТЕХНОЛОГИИ



Донецк 2018

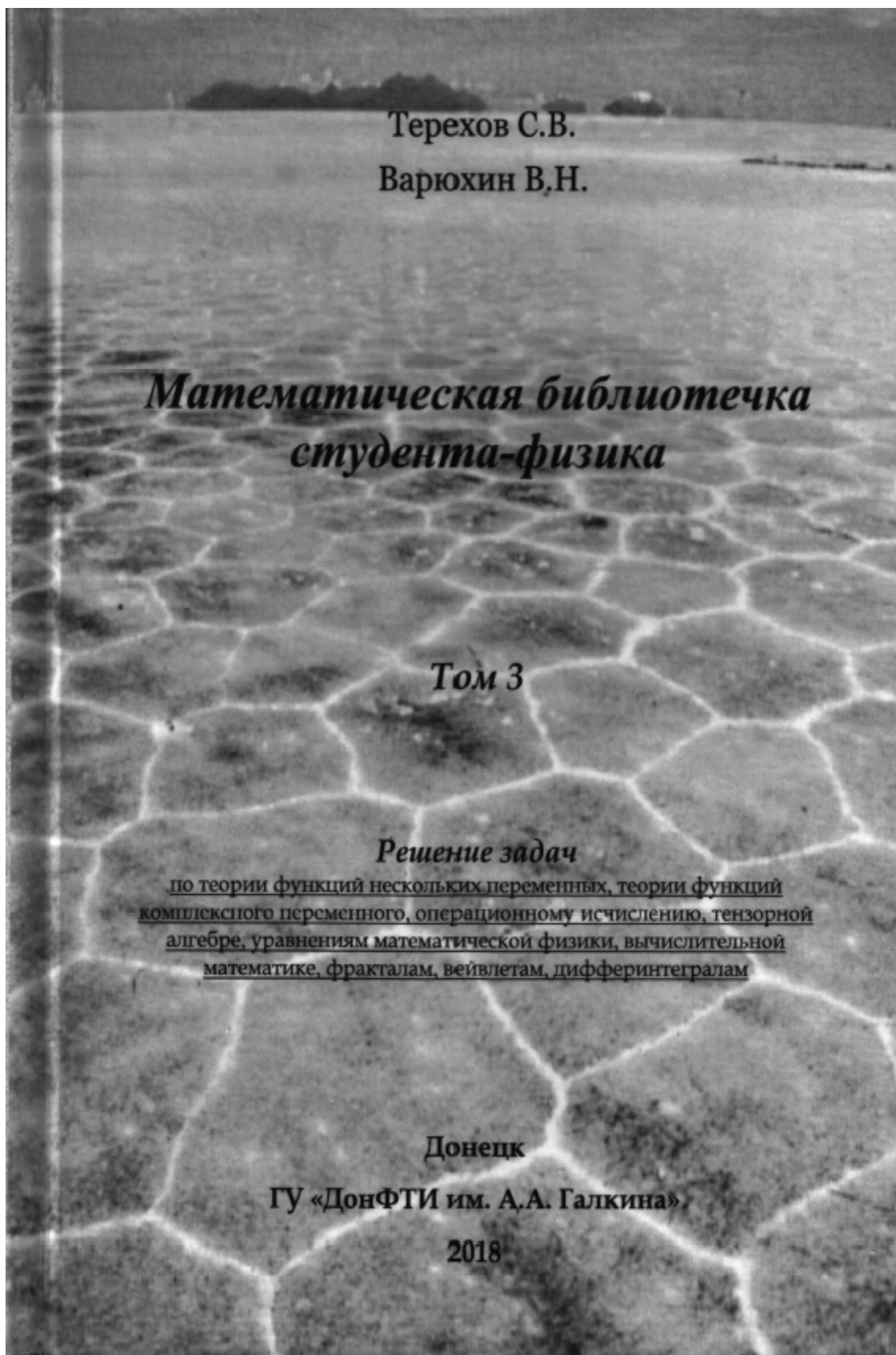
Донецк: Изд-во ДонНУ, 2018. – 261 с.



Донецк: Изд-во ГУ «ДонФТИ им. А.А. Галкина», Т1, 2018. – 411 с.



Донецк: Изд-во ГУ «ДонФТИ им. А.А. Галкина», Т2, 2018. – 425 с.

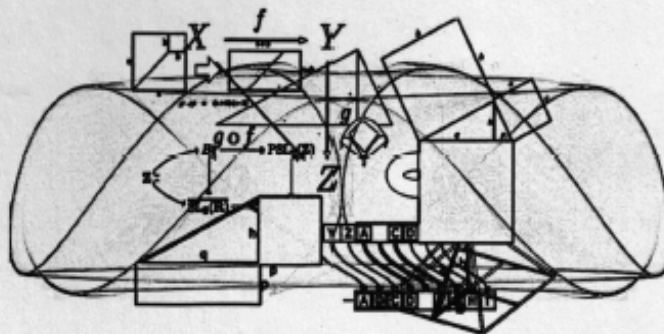


Донецк: Изд-во ГУ «ДонФТИ им. А.А. Галкина», Т3, 2018. – 521 с.

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
ДОНЕЦКОЙ НАРОДНОЙ РЕСПУБЛИКИ
ГОУ ВПО «ДОНЕЦКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ
КАФЕДРА ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ И НАНОТЕХНОЛОГИЙ

С. В. Терехов, В. Н. Варюхин, А. Г. Петренко

**ВАРИАЦИОННЫЕ ПРИНЦИПЫ
КЛАССИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ**



Донецк 2018

Донецк: Изд-во ДонНУ, 2018. – 52 с.

Терехов Сергей Владимирович, д.ф.-м.н., доц.

Научно-методические труды

1979

1. Косачевский Л.Я., Терехов С.В. О влиянии градиента температуры на течение в вязко-пластичном пограничном слое. – Теоретическая и прикладная механика. – Киев-Донецк, 1979, вып. 10, с.117-119.

1980

1. Филиппов Е.И., Терехов С.В. Многослойная структура эпитаксиальных пленок ферритов-гранатов. – III Всесоюзная школа по доменным и магнитооптическим запоминающим устройствам. – Астрахань, 1980, с.17.

1982

1. Филиппов Е.И., Терехов С.В. Исследование слоистой структуры гранатовых пленок. – VIII Всесоюзная школа-семинар “Новые магнитные материалы для микроэлектроники”. – Донецк, 1982.

2. Захаров А.Ю., Терехов С.В. Решеточная модель газа с двухчастичным взаимодействием. – IV Всесоюзная школа-семинар “Применение математических методов для изучения и описания физико-химических равновесий”. – Иркутск, 1982, с.92.

1983

1. Захаров А.Ю., Терехов С.В. Решеточная модель фазообразования. – Республиканская конференция по нелинейным задачам математической физики. – Донецк, 1983, с.52.

2. Захаров А.Ю., Терехов С.В. Решеточная модель многокомпонентных жидкостей. – Физико-химический анализ гомогенных и гетерогенных систем. – Саратов, 1983, с.28-29.

3. Мельничук И.А., Терехов С.В., Филиппов Е.И. Экспериментальное исследование слоистой структуры эпитаксиальных феррит-гранатовых пленок. – Журнал технической физики, 1983, т.53, вып.1, с.185-189.

1985

1. Захаров А.Ю., Терехов С.В. Теория диффузии атомов в сплавах. – Физика металлов и металловедение, 1985, т.59, вып.2, с.261-268.

2. Захаров А.Ю., Терехов С.В. Диффузионная кинетика фазовых переходов в многокомпонентных системах. – Математические задачи химической термодинамики. – Новосибирск, 1985, с.162-173.

3. Захаров А.Ю., Терехов С.В. Обобщенная решеточная модель фазовых равновесий в многокомпонентных системах. – Математические задачи химической термодинамики. – Новосибирск, 1985, с.173-181.

1986

1. Терехов С.В. К термодинамике многокомпонентных конденсированных растворов. – II Всесоюзная конференция “Закономерности формирования структуры эвтектического типа”, ч.1. – Днепропетровск, 1986, с.54-55.

2. Терехов С.В., Захаров А.Ю., Гаврик С.И. Спинодальный распад и взаимная диффузия. – II Всесоюзная конференция “Закономерности формирования структуры эвтектического типа”, ч.1. – Днепропетровск, 1986, с.97-98.

3. Захаров А.Ю., Гаврик С.И., Терехов С.В. Обобщенная решеточная модель многокомпонентных растворов. – III Всесоюзная конференция “Термодинамика и материаловедение полупроводников”, т.1. – Москва, 1986, с.85-86.
4. Терехов С.В., Иванов Е.Л., Корзун Е.Л. и др. Термодинамический анализ шлаковых кальцийсодержащих расплавов. – VI Всесоюзная конференция по строению и свойствам металлических и шлаковых расплавов, ч.3. – Свердловск, 1986, с.128-129.
5. Радченко В.Н., Рябцев А.Д., Терехов С.В. и др. Способ электрошлакового переплава тугоплавких металлов. – А.с. СССР № 1380227 от 20.03.86, не публ.
6. Тарлов О.В., Радченко В.Н., Терехов С.В. и др. Способ рафинирования хрома. – А.с. СССР № 1400110 от 24.03.86, не публ.
7. Терехов С.В., Радченко В.Н., Иванов Е.Л. и др. Флюс для ЭШП. – А.с. СССР № 1407065 от 30.06.86, не публ.
8. Тарлов О.В., Радченко В.Н., Терехов С.В. и др. Флюс для ЭШП. – А.с. СССР № 1407066 от 28.10.86, не публ.
9. Радченко В.Н., Терехов С.В., Корзун Е.Л. и др. Флюс для ЭШП. – А.с. СССР № 1410540 от 30.06.86, не публ.
10. Терехов С.В., Радченко В.Н., Литвинов В. И. и др. Флюс для ЭШП. – А.с. СССР № 142 4345 от 20.03.86, не публ.
11. Мухин Ю.М., Пилюшенко В.П., Терехов С.В. и др. Способ легирования при ЭШП расходуемых электродов. – А.с. СССР № 1420048 от 30.06.86, не публ.

1987

1. Радченко В.Н., Тарлов О.В., Терехов С.В. и др. – Способ ЭШП. – А.с. СССР № 1443420 от 16.03.87, не публ.
2. Корзун Е.Л., Терехов С.В. Расчет термодинамических свойств жидких растворов $Fe-Cr$ и $Fe-Ni$. – Журнал физической химии, 1987, т.61, № 5, с.1186-1189.
3. Терехов С.В., Радченко В.Н., Тарлов О.В. Активности компонентов металлургических шлаков $CaO-CaF_2$, $CaF_2-Al_2O_3$, Al_2O_3-CaO . – VI Всесоюзная научная конференция по современным проблемам электрометаллургии стали. – Челябинск, 1987, с.6-7.
4. Корзун Е.Л., Мухин Ю.М., Терехов С.В., Радченко В.Н. О возможности введения церия в сталь. – VI Всесоюзная научная конференция по современным проблемам электрометаллургии стали. – Челябинск, 1987, с.12.
5. Терехов С.В., Тарлов О.В., Радченко В.Н., Рябцев А.Д. Активности компонентов в шлаковых системах $CaO-CaF_2$, $Al_2O_3-CaF_2$, $Ca-CaF_2$. – Проблемы специальной электрометаллургии, 1987, № 4, с.7-10.
6. Терехов С.В., Тарлов О.В., Радченко В.Н., Рябцев А.Д. Термодинамический анализ шлаковой системы $Ca-CaF_2-CaO$. – Проблемы специальной электрометаллургии, 1987, № 4, с.10-12.

1988

1. Терехов С.В., Тарлов О.В., Радченко В.Н. Расчет диаграмм эвтектического типа с отсутствием растворимости компонентов в твердом состоянии. – Журнал физической химии, 1988, т.62, № 7, с.1950-1952.
-

2. Терехов С.В., Корзун Е.Л. Термодинамический анализ расплавов $Se-Cr$. – Известия АН СССР. Металлы, 1988, № 4, с.65-68.
3. Терехов С.В. Термодинамические функции и фазовые равновесия в двойных конденсированных растворах. – Известия АН СССР. Металлы, 1988, № 5, с.43-48.
4. Рябцев А.Д., Радченко В.Н., Терехов С.В. и др. Способ получения расходуемых электродов. – А.с. СССР № 1624815 от 21.10.88, не публ.

1989

1. Радченко В.Н., Тарлов О.В., Терехов С.В. Флюс для ЭШП. – А.с. СССР № 1503306 от 22.04.89, не публ.
2. Терехов С.В. Прогнозирование термодинамических свойств многокомпонентных систем. – VI Всесоюзная школа-семинар “Применение математических методов для изучения и описания физико-химических равновесий”, ч.1. – Новосибирск, 1989, с.149-150.
3. Терехов С.В., Радченко В.Н. О растворимости кислорода в алюминотермическом хrome. – Известия АН СССР. Металлы, 1989, № 2, с.13-15.
4. Мухин Ю.М., Пилюшенко В.П., Терехов С.В. и др. Влияние условий легирования на распределение легирующих элементов в отливке ЭШП. – Проблемы специальной электрометаллургии, 1989, № 1, с.3-6.
5. Мухин Ю.М., Троянский А.А., Терехов С.В. Проблемы легирования при ЭШП. – Проблемы и перспективы развития спецэлектрометаллургии, ч.1 “Электрошлаковый переплав”. – М., 1989, с.105-107, не публ.

1990

1. Терехов С.В., Радченко В.Н., Иванов Е.Л. Оценка рафинирующей способности флюсов системы $Me-MeF_2$. – Проблемы специальной электрометаллургии, 1990, № 1, с.11-14.
2. Терехов С.В., Радченко В.Н. Функции смешения двойных растворов тугоплавких металлов. – Известия вузов. Черная металлургия, 1990, № 3, с.8-11.
3. Терехов С.В., Корзун Е.Л., Радченко В.Н. и др. Термодинамические свойства металлического компонента в металлосодержащих фторидных флюсах. – Известия АН СССР. Металлы, 1990, № 3, с.40-43.
4. Терехов С.В., Корзун Е.Л. Термодинамическое описание бинарных конденсированных растворов редкоземельный элемент-хром. – Журнал физической химии, 1990, т.64, № 5, с.1203-1207.
5. Терехов С.В., Радченко В.Н. Испарение хрома из расплавов двойных систем. – Известия АН СССР. Металлы, 1990, № 5, с.49-51.
6. Наконечный А.Я., Романенко В.И., Терехов С.В. и др. Способ обработки стали в ковше. – Положительное решение от 19.07.90 по заявке № 4713103/02.

1991

1. Терехов С.В. Равновесное распределение компонентов в неоднородной системе и диффузионная кинетика его достижения. – Известия АН СССР. Металлы, 1991, № 4, с.144-151.
 2. Терехов С.В. Границы метастабильности и электрические свойства ионных расплавов. – Известия АН СССР. Металлы, 1991, № 5, с.42-46.
-

1995

1. Захаров А.Ю., Локтионов И.К., Терехов С.В. Метод факторизации в задачах классической статистической механики. Расчет бинодали и спинодали однокомпонентных систем в окрестности критической точки. – Деп. в ГНТБ Украины 10.01.95, УК 95.
2. Щербак Я.Я., Мироненко Л.П., Терехов С.В. и др. Методические указания к типовому расчету по разделу курса высшей математики “Дифференциальная геометрия” (для студентов специальности “Прикладная геодезия”). – Донецк, ДГТУ, 1995, 60с.

1996

1. Корзун Е.Л., Радченко В.Н., Терехов С.В. Равновесное распределение церия между шлаками системы $CaF_2 - CeF_3$ и сплавами на основе железа. – *Металлы*, 1996, № 3, с.21-28.
2. Терехов С.В., Щербак Я.Я., Мироненко Л.П. и др. Методические указания к разделу курса высшей математики “Интегральное исчисление”, ч.1, “Неопределенный интеграл” (для студентов всех специальностей). – Донецк, ДГТУ, 1996, 49с.
3. Ехилевский С.Г., Фоменко Т.П., Терехов С.В. Исследование кривых II порядка на лекциях и практических занятиях в техническом вузе. – Донецк, ДГТУ, 1996, 18с.
4. Терехов С.В., Ехилевский С.Г. Алгебраическая классификация кривых второго порядка с использованием теории инвариантов. – Донецк, ДГТУ, 1996, 14с.
5. Терехов С.В. Теория инвариантов и классификация кривых II порядка. – *Евристика та дидактика точних наук*, вып. 6. – Донецк, 1996, с.54-55.

1997

1. Шкляр В.С., Терехов С.В. О влиянии электрического поля на металл. – *Металлы*, 1997, № 3, с.148-151.

1998

1. Терехов С.В., Русанов А.В. Эффекты Френкеля и Киркендалла-Смигельскаса. – *Наука-практика (научно-метод. сб.)*, вып. 3. – Донецк: ДГТУ, 1998, с.146-151.

2001

1. Терехов С.В., Сопильняк И.В., Левицкий Д.А. Кривая сосуществования фаз чистого вещества. – *Наука-практика (научно-метод. сб.)*, вып. 3.– Донецк: ДГТУ, 2001, с.195-199.
2. Терехов С.В., Кандыбко М.Ю., Скрыль И.П. и др. Бинарные системы. Диаграммы состояния. – *Наука-практика (научно-метод. сб.)*, вып. 6. – Донецк: ДГТУ, 2001, с.71-83.
3. Терехов С.В., Кандыбко М.Ю., Довгалева И.М. Псевдорегулярный раствор атомов и вакансий. – *Наука-практика (научно-метод. сб.)*, вып. 6. – Донецк: ДГТУ, 2001, с.124-129.
4. Терехов С.В., Кандыбко М.Ю., Романенко А.Д. Межатомные взаимодействия и химические реакции. – *Наука-практика (научно-метод. сб.)*, вып. 6. – Донецк: ДГТУ, 2001, с.149-154.
5. Терехов С.В. Математика для абитуриентов. – Донецк, 2001, 248с.

2002

1. Терехов С.В. Физика и гиперкомплексное исчисление. – *Вісник Донецького університету. Серія А: Природничі науки*, 2002, № 2, с. 287-294.
-

2004

1. Терехов С.В. Об использовании алгебры Клиффорда в физической теории. – Вестник Новгородского государственного университета. Серия : Технические науки, 2004, № 26, с. 56-62.

2005

1. Конспект лекций по некоторым разделам высшей математики (основы линейной и векторной алгебр, аналитической геометрии и математического анализа) для студентов заочной формы обучения. Первый семестр. / Сост.: Терехов С.В. – Донецк: ДНТУ, 2005. – (рус. – 94с.; укр. – 92с.).

2. Конспект лекций по некоторым разделам высшей математики (интегральное исчисление, дифференциальные уравнения 1 и 2 порядков) для студентов заочной формы обучения. Второй семестр. / Сост.: Терехов С.В. – Донецк: ДНТУ, 2005. – (рус. – 60с.; укр. – 57с.).

3. Конспект лекций по некоторым разделам высшей математики (основы теории вероятностей и математической статистики) для студентов заочной формы обучения. Третий семестр. / Сост.: Терехов С.В. – Донецк: ДНТУ, 2005. – (рус. – 42с.; укр. – 39с.).

4. Сборник индивидуальных контрольных заданий для студентов заочной формы обучения. / Составитель: Терехов С.В. – Донецк: ДНТУ, 2005. – (рус. – 58с.; укр. – 56с.).

5. Краткие теоретические сведения по некоторым разделам высшей математики (основы линейной и векторной алгебр; аналитическая геометрия на плоскости и в пространстве) и индивидуальные задания из методических разработок преподавателей кафедры для студентов специальностей ОМД и ТО физико-металлургического факультета. Первый курс, первый семестр. Часть 1 / Сост.: Терехов С.В. – Донецк: ДНТУ, 2005. – 49с.

6. Краткие теоретические сведения по некоторым разделам высшей математики (пределы и непрерывность функции; дифференциальное исчисление и исследование функций с помощью производных) и индивидуальные задания из методических разработок преподавателей кафедры для студентов специальностей ОМД и ТО физико-металлургического факультета. Первый курс, первый семестр. Часть 2 / Сост.: Терехов С.В. – Донецк: ДНТУ, 2005. – 54с.

7. Краткие теоретические сведения по некоторым разделам высшей математики (неопределенный и определенный интегралы) и индивидуальные задания из методических разработок преподавателей кафедры для студентов специальностей ОМД и ТО физико-металлургического факультета. Первый курс, второй семестр. Часть 3 / Сост.: Терехов С.В. – Донецк: ДНТУ, 2005. – 69с.

8. Краткие теоретические сведения по некоторым разделам высшей математики (дифференциальные уравнения; ряды) и индивидуальные задания из методических разработок преподавателей кафедры для студентов специальностей ОМД и ТО физико-металлургического факультета. Первый курс, второй семестр. Часть 4 / Сост.: Терехов С.В. – Донецк: ДНТУ, 2005. – 69с.

9. Краткие теоретические сведения по некоторым разделам высшей математики (тензорная алгебра и ее применение) и индивидуальные задания из методических разработок преподавателей кафедры для студентов специальностей ОМД и ТО физико-

металлургического факультета. Второй курс, третий семестр. Часть 5 / Сост.: Терехов С.В. – Донецк: ДНТУ, 2005. – 57с.

10. Краткие теоретические сведения по некоторым разделам высшей математики (теория вероятностей; математическая статистика) и индивидуальные задания из методических разработок преподавателей кафедры для студентов специальностей ОМД и ТО физико-металлургического факультета. Второй курс, третий семестр. Часть 6 / Сост.: Терехов С.В. – Донецк: ДНТУ, 2005. – 90с.

11. Сборник семестровых контрольных работ для студентов всех специальностей очной формы обучения. / Сост.: Терехов С.В. – Донецк: ДНТУ, 2005. – 79с.

12. Терехов С.В. Генерация алгебр пространств Евклида и специальной теории относительности. – Вісник Донецького університету, Сер. А: Природничі науки, 2005, вип.1, с. 163-174.

13. Терехов С.В., Артеменков С.Л., Брага А.В. Статистическая обработка данных испытаний стали 45. – В кн.: Прикладные задачи математики. Материалы I Международной научно-технической студенческой конференции. – Донецк: ДонНТУ, 2005, с.90-103.

14. Терехов С.В., Брага А.В., Артеменков С.Л. Статистическая обработка данных испытаний стали 36Г2С. – В кн.: Прикладные задачи математики. Материалы I Международной научно-технической студенческой конференции. – Донецк: ДонНТУ, 2005, с.104-112.

15. Терехов С.В., Чикунев А.А. Нахождение действительных корней кубических уравнений в поле вещественных чисел. – В кн.: Прикладные задачи математики. Материалы I Международной научно-технической студенческой конференции. – Донецк: ДонНТУ, 2005, с.174-177.

16. Терехов С.В. Непрерывно-решеточная модель многокомпонентных систем. – Физика и техника высоких давлений, 2005, т.15, № 3, с. 47-62.

2006

1. Терехов С.В. Математический практикум для абитуриентов. – Донецк: Норд-Пресс, 2006. – 240 с.

2. Терехов С.В. О возможности применения псевдокватернионов к описанию кинетических процессов. – Физика и техника высоких давлений, 2006, т.16, № 2, с.55-62.

3. Терехов С.В. Вириальное уравнение состояния “решеточного” газа и его поведение в окрестности критической точки фазового перехода. – Физика и техника высоких давлений, 2006, т.16, № 3, с.7-20.

4. Терехов С.В. Инварианты и допустимые движения в гиперпространстве. – Вісник Донецького університету. Серія А: Природничі науки, 2006, № 1, с. 7-14.

5. Терехов С.В. Навчальний посібник з “вищої математики” та індивідуальні завдання для студентів спеціальності 7.050.104 “Фінанси” (перепідготовка) – Донецьк: Донецька філія Міжнародного університету фінансів, 2006. – 192с.

6. Терехов С.В. Навчальний посібник з “теорії ймовірностей і математичної статистики” та індивідуальні завдання для студентів спеціальності 7.050.104 “Фінанси” (перепідготовка) – Донецьк: Донецька філія Міжнародного університету фінансів, 2006. – 84с.

7. Терехов С.В., Приходько А.П. Самодиффузионная стадия фазообразования. – Металлофизика и новейшие технологии, 2006, т. 28, № 12, с. 1681-1697.

2007

1. Терехов С.В. Моделирование тепловых и кинетических свойств реальных систем. – Донецк: “Вебер” (Донецкое отделение), 2007. – 306с.
2. Терехов С.В. Взаимная диффузия в конденсированных растворах. – Журнал технической физики, 2007, т. 77, № 8, с.36-43. (Россия). Terekhov S.V. Interdiffusion in condensed solution. – Technical Physics, 2007, Vol. 52, No. 8, p.p. 998-1005.
3. Terekhov S.V. Critical behaviour of one-component system in the self-consistent generalized latticed model. – Physics Letters A, 2007, v. 366, p.p. 332-334 (Issues 4-5, 2 July 2007) (Голландия).

2008

1. Терехов С.В. Кватернионный аспект теории поля и вещества. – Вісник Донецького університету. Серія А: Природничі науки, 2008, № 2, с. 162-170.

2009

1. Терехов С.В. Синергетика и менеджмент// Зб. науково-методичних робіт. – Вип. 6. – Донецьк: ДонНТУ, 2009. – С. 72-80.
2. Терехов С.В. Введение в синергетику. – Донецк: “Цифровая типография”, 2009. – 187 с.
3. Терехов С.В. Как решать задачи по высшей математике. – Донецк: ДонНУ, 2009. – 676 с. (Як вирішувати задачі по вищій математиці. – Донецьк: ДонНУ, 2009. – 654 с.) (e-вид).
4. Терехов С.В. Лекции и практические задачи по основным разделам классической математики. – Донецк: ДонНУ, 2009. – 497 с. (e-вид).

2010

1. Терехов С.В., Богуцкий В.Б., Одыница Б.С. Самоорганизация при формировании искусственного интеллекта. – Математична культура інженера, ч.1. – Донецк: РВВ ДонНТУ. – 2010. – С. 159-164.
2. Терехов С.В., Пономаренко Д.В., Байшер Н.О. Связь хаотизации и информации в системе Рёсслера. – Математична культура інженера, ч.1. – Донецк: РВВ ДонНТУ. – 2010. – С. 201-204.
3. Терехов С.В., Самойленко Ю.В., Андриенко Е.Н. Случайные фракталы. – Математична культура інженера, ч.1. – Донецк: РВВ ДонНТУ. – 2010. – С. 208-211.
4. Терехов С.В., Ковалёва К.Д., Бичёва М.В. Дифференциалы. – Математична культура інженера, ч.2. – Донецк: РВВ ДонНТУ. – 2010. – С. 185-189.
5. Терехов С.В., Локтионов И.К. Второй вириальный коэффициент в системах с центральным межчастичным взаимодействием. – Международная научная конференция “Химическая термодинамика и термодинамические характеристики компонентов”. – Донецк, 2010. – С. 79-81.

2011

1. Терехов С.В. Фракталы и физика подобия. – Донецк: Цифровая типография, 2011. – 255 с.
2. Терехов С.В., Локтионов И.К. Расчёт термодинамических свойств чистых веществ по методу Гиббса. – Физика и техника высоких давлений, 2011, т. 21, №1, с.14-25.
3. Терехов С.В., Гусар Г.А. Математический инструментарий для студентов. Т.1. Инструментарий (методика решения задач). – Донецк: Цифровая типография, 2011. – 540 с.

4. Терехов С.В., Гусар Г.А. Математический инструментарий для студентов. Т.2. Задачи. – Донецк: Цифровая типография, 2011. – 511 с.
5. Терехов С.В. Моделирование тепловых и кинетических свойств реальных систем (Изд. 2-е, испр., доп.). – Saarbrücken (Germany): Lambert Academic Publishing, 2011. – 421 с.
6. Терехов С.В., Гаркуша В.В., Пойманов В.Д. Математический практикум для абитуриентов, ч.1. – Донецк: ДонНУ, 2011. – 157 с.
7. Терехов С.В. Наномир. Т.1. Объекты, свойства, применения. – Донецк: ДонНТУ, 2011. – 410 с.
8. Терехов С.В. Наномир. Т.2. Макросистемы, моделирование. – Донецк: ДонНТУ, 2011. – 414 с.

2012

1. Терехов С.В. Универсальность синергетических законов. I. Основные характеристики масштабных уровней. – Физика и техника высоких давлений, 2012, т. 22, № 1, с.33-54.
2. Терехов С.В. Универсальность синергетических законов. II. Поверхность раздела фаз. – Физика и техника высоких давлений, 2012, т. 22, № 2, с.22-36.
3. Терехов С.В., Локтионов И.К. Термодинамические силы и теорема Гельмгольца. – В сборнике докладов II Международной научной конференции “Химическая термодинамика и кинетика”. – Донецк: ДонНТУ, 2012. – С. 133-134.
4. Терехов С.В., Гаркуша В.В., Пойманов В.Д. Математический практикум для абитуриентов, ч.2. – Донецк: ДонНУ, 2012. – 202 с.

2013

1. Кирбаба М.С., Терехов С.В. Возникновение структур при развитии конвективной неустойчивости. – Студентська наукова конференція фізико-технічного факультету Донецького національного університету за період 2012-2013 учбового року. Донецк: ДонНУ, 2013. – С. 20-21.
2. Терехов С.В., Варюхин В.Н. Физика нанообъектов. – Донецк: ДонНУ, 2012. – 418 с.
3. Терехов С.В., Локтионов И.К. Универсальность синергетических законов. III. Экстенсивная термодинамика и кинетика процессов. – Физика и техника высоких давлений, 2013, т. 23, № 4, с. 5-19.

2014

1. Терехов С.В. Универсальность синергетических законов. IV. Энтропия Цаллиса и неэкстенсивная термодинамика. – Физика и техника высоких давлений, 2014, т. 24, № 1, с. 5-24.
2. Локтионов И.К., Терехов С.В., Рубцова О.А. Применение осциллирующих потенциалов для моделирования равновесных свойств простых жидкостей. – Физика и техника высоких давлений, 2014, т. 24, № 1, с. 54-73.
3. Терехов С.В., Саяпин В.Н. Универсальность синергетических законов. V. Диаграммы напряжение-деформация. – Физика и техника высоких давлений, 2014, т. 24, № 3-4, с. 39-57.

2015

1. Терехов С.В. Влияние микропараметров частиц на характеристики химической реакции // Сб. докладов Пятой Международной научной конференции. – Великий
-

Новгород: НовГУ, 2015. – С. 211-213.

2. Терехов С.В. Физико-геометрические характеристики гиперпространства. I. Обобщённая система Серре-Френе. Физический изоморфизм кватернионной алгебры Гамильтона. – Физика и техника высоких давлений, 2015, т. 25, № 1-2, с. 5-19.

3. Терехов С.В. Физико-геометрические характеристики гиперпространства. II. Базисные кватернионы. Механика материальной частицы. – Физика и техника высоких давлений, 2015, т. 25, № 3-4, с. 112-121.

4. Терехов С.В. Отображение физической реальности (избранные научные труды). – Донецк: Самиздат, 2015. – 625 с. (Ресурс доступа: www.donfti.ru)

2016

1. Варюхин В.Н., Терехов С.В. Наноматериалы. – Донецк: ДонНУ, 2016. – 348 с.

2. Терехов С.В. Энтропийный подход к проблеме неравновесности. – Сб. научных трудов «Шестая Международная научная конференция «Химическая термодинамика и кинетика» 30 мая – 3 июня 2016 г.». – Тверь: ТверГУ, 2016. – С. 262-263.

3. Терехов С.В. Физико-геометрические характеристики гиперпространства. III. Целлярный и субстанциональный операторы. Дефект кватернионной производной. – Физика и техника высоких давлений, 2016, т. 26, № 1-2, с. 106-117.

4. Терехов С.В. Физико-геометрические характеристики гиперпространства. IV. Солитон Хасимото. Механическое движение целлы. – Физика и техника высоких давлений, 2016, т. 26, № 3-4, с. 129-140.

2017

1. Локтионов И.К., Терехов С.В., Ткач В.И. Теплоемкости вакансионной и корпускулярной подсистем конденсированной среды. – Мониторинг. Науки и технологии, 2017, № 1 (30), с. 51-57.

2. Терехов С.В., Варюхин В.Н., Мельник Т.Н., Юрченко В.М. Термодинамическая концепция неравновесности. I. Функция неравновесности. Модели компенсации. – Физика и техника высоких давлений, 2017, т. 27, № 1, с. 103-116.

3. Терехов С.В., Варюхин В.Н. Математическая библиотечка студента-физика. Часть 1. Решение задач по линейной алгебре / Справочное издание для студентов физико-технических факультетов университетов и педагогических институтов. – Донецк: ГОУ ВПО «ДонНУ», 2017. – 89 с. (e-вид).

4. Терехов С.В., Варюхин В.Н. Математическая библиотечка студента-физика. Часть 2. Решение задач по векторной алгебре / Справочно-учебное издание для студентов физико-технических факультетов университетов и педагогических институтов. – Донецк: ГОУ ВПО «ДонНУ», 2017. – 60 с. (e-вид).

5. Терехов С.В., Варюхин В.Н. Математическая библиотечка студента-физика. Часть 3. Решение задач по аналитической геометрии / Справочно-учебное издание для студентов физико-технических факультетов университетов и педагогических институтов. – Донецк: ГОУ ВПО «ДонНУ», 2017. – 111 с. (e-вид).

6. Терехов С.В., Варюхин В.Н. Математическая библиотечка студента-физика. Часть 4. Решение задач по математическому анализу: пределы, непрерывные функции одной переменной / Справочно-учебное издание для студентов физико-технических факультетов университетов и педагогических институтов. – Донецк: ГОУ ВПО «ДонНУ», 2017. – 59 с. (e-вид).

7. Терехов С.В., Варюхин В.Н. Математическая библиотечка студента-физика. Часть 5. Решение задач по математическому анализу: производная, исследование функций с помощью производных / Справочно-учебное издание для студентов физико-технических факультетов университетов и педагогических институтов. – Донецк: ГОУ ВПО «ДонНУ», 2017. – 76 с. (e-вид).
8. Терехов С.В., Варюхин В.Н., Мельник Т.Н., Петренко А.Г., Юрченко В.М. Термодинамическая концепция неравновесности. II. Состояния неравновесной системы и их эволюция. – Физика и техника высоких давлений, 2017, т. 27, № 2, с. 83-97.
9. Терехов С.В., Варюхин В.Н. Математическая библиотечка студента-физика. Часть 6. Решение задач по математическому анализу: неопределённый интеграл / Справочно-учебное издание для студентов физико-технических факультетов университетов и педагогических институтов // С.В. Терехов, В.Н. Варюхин. – Донецк: ГОУ ВПО «ДонНУ», 2017. – 71 с. (e-вид).
10. Терехов С.В., Варюхин В.Н. Математическая библиотечка студента-физика. Часть 7. Решение задач по математическому анализу: определённый интеграл / Справочно-учебное издание для студентов физико-технических факультетов университетов и педагогических институтов // С.В. Терехов, В.Н. Варюхин. – Донецк: ГОУ ВПО «ДонНУ», 2017. – 60 с. (e-вид).
11. Терехов С.В. Физико-геометрические характеристики гиперпространства. V. Поле гипердвойных кватернионов. – Физика и техника высоких давлений, 2017, т. 27, № 3, с. 69-79.
12. Терехов С.В., Варюхин В.Н. Математическая библиотечка студента-физика. Часть 8. Решение задач по математическому анализу: дифференциальные уравнения / Справочно-учебное издание для студентов физико-технических факультетов университетов и педагогических институтов // С.В. Терехов, В.Н. Варюхин. – Донецк: ГОУ ВПО «ДонНУ», 2017. – 73 с. (e-вид).
13. Терехов С.В., Варюхин В.Н. Математическая библиотечка студента-физика. Часть 9. Решение задач по математическому анализу: ряды / Справочно-учебное издание для студентов физико-технических факультетов университетов и педагогических институтов // С.В. Терехов, В.Н. Варюхин. – Донецк: ГОУ ВПО «ДонНУ», 2017. – 66 с. (e-вид).

2018

1. Терехов С.В., Варюхин В.Н. Математическая библиотечка студента-физика. Часть 10. Решение задач по теории вероятностей и математической статистике / Справочно-учебное издание для студентов физико-технических факультетов университетов и педагогических институтов // С.В. Терехов, В.Н. Варюхин. – Донецк: ГОУ ВПО «ДонНУ», 2018. – 169 с. (e-вид).
 2. Терехов С.В., Варюхин В.Н. Математическая библиотечка студента-физика. Часть 11. Решение задач по математическому анализу: функции нескольких переменных / Справочно-учебное издание для студентов физико-технических факультетов университетов и педагогических институтов // С.В. Терехов, В.Н. Варюхин. – Донецк: ДонНУ. – 2018. – 107 с. (e-вид).
 3. Терехов С.В., Варюхин В.Н. Математическая библиотечка студента-физика. Часть 12. Решение задач по тензорной алгебре / Справочно-учебное издание для студентов фи-
-

зико-технических факультетов университетов и педагогических институтов // С.В. Терехов, В.Н. Варюхин. – Донецк: ДонНУ. – 2018. – 78 с. (e-вид).

4. Терехов С.В., Варюхин В.Н. Математическая библиотечка студента-физика. Часть 13. Решение задач по теории функций комплексной переменной, операционному исчислению / Справочно-учебное издание для студентов физико-технических факультетов университетов и педагогических институтов // С.В. Терехов, В.Н. Варюхин. – Донецк: ДонНУ. – 2018. – 125 с. (e-вид).

5. Терехов С.В., Варюхин В.Н. Математическая библиотечка студента-физика. Часть 14. Решение задач по математической физике, вычислительной математике (для студентов специальности “Теоретическая физика”) / Справочно-учебное издание для студентов физико-технических факультетов университетов и педагогических институтов // С.В. Терехов, В.Н. Варюхин. – Донецк: ДонНУ. – 2018. – 91 с. (e-вид).

6. Терехов С.В., Варюхин В.Н. Математическая библиотечка студента-физика. Часть 15. Решение задач по фрактальной геометрии, вейвлет-анализу и теории дифференциалов (для студентов специальности “Теоретическая физика”) / Справочно-учебное издание для студентов физико-технических факультетов университетов и педагогических институтов // С.В. Терехов, В.Н. Варюхин. – Донецк: ДонНУ. – 2018. – 95 с. (e-вид).

7. Терехов С.В., Варюхин В.Н., Мельник Т.Н., Петренко А.Г., Юрченко В.М. Термодинамическая концепция неравновесности. III. Реакция системы. Возникновение иерархий / Физика и техника высоких давлений, 2018. – Т. 28, № 1. – С. 5-12.

8. Терехов С.В. Термодинамическая модель размытого фазового перехода в металлическом стекле $Fe_{40}Ni_{40}P_{14}V_6$ / Физика и техника высоких давлений, 2018. – Т. 28, № 1. – С. 54-61.

9. Терехов С.В. Физико-геометрические характеристики гиперпространства. VI. Закон сохранения физической величины и закон изменения ее потока. – Физика и техника высоких давлений, 2018. – Т. 28, № 2. – С. 74-80.

10. Терехов С.В. Вариационные принципы классической механики / Учебн. изд. // С.В. Терехов, В.Н. Варюхин, А.Г. Петренко. – Донецк: ГОУ ВПО «ДонНУ». – 2018. – 52 с.

11. Терехов С.В., Варюхин В.Н. Математическая библиотечка студента-физика. Том 1 (части I и II). – Донецк: ГОУ ВПО «ДонНУ». – 2018. – 411 с.

12. Терехов С.В., Варюхин В.Н. Математическая библиотечка студента-физика. Том 2 (части III-V). – Донецк: ГОУ ВПО «ДонНУ». – 2018. – 425 с.

13. Терехов С.В., Варюхин В.Н. Математическая библиотечка студента-физика. Том 3 (часть VI, для студентов специальности «Теоретическая физика», части I-III). – Донецк: ГОУ ВПО «ДонНУ». – 2018. – 521 с.

14. Терехов С.В., Лимановский А.И. «Фаза пустоты» и размытый фазовый переход / Физика и техника высоких давлений, 2018. – Т. 28, № 3. – С. 65-74.

15. Терехов С.В., Варюхин В.Н., Юрченко В.М. Нанотехнологии. – Донецк: ДонНУ, 2018. – 261 с.

2019

1. Лимановский А.И., Саяпин В.Н., Ткаченко В.М., Свиридова Е.А., Парфений В.И., Васильев С.В., Терехов С.В., Ткач В.И. Консолидация методом кручения под высо-

ким давлением ленточных образцов алюминиевых сплавов с аморфной и кристаллической структурой / Физика и техника высоких давлений, 2019. – Т. 29, № 2. – С. 5-13.

2. Терехов С.В. Размытый фазовый переход в аморфном сплаве $Fe_{40}Ni_{40}P_{14}B_6$: термодинамика и кинетика кристаллизации / Физика и техника высоких давлений, 2019. – Т. 29, № 2. – С. 24-39.

3. Лимановский А.И., Саяпин В.Н., Ткаченко В.М., Цветков Т.В., Свиридова Е.А., Парфений В.И., Васильев С.В., Терехов С.В., Ткач В.И. Структура и механические свойства образцов из быстроохлажденных сплавов на основе Al, консолидированных методом кручения под высоким давлением // Релаксационные явления в твердых телах: материалы XXIV международной конференции (г. Воронеж, 24-27 сентября 2019 г.). – Воронеж: ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет». – 2019 (220 с.). – С. 52-53.

4. Терехов С.В., Запорожец В.Д. Границы термической устойчивости аморфного материала. I. Взаимодействие фаз в приближении среднего поля / Физика и техника высоких давлений, 2019. – Т. 29, № 3. – С. 65-72.

5. Терехов С.В. Границы термической устойчивости аморфного материала. II. Субрегулярная совокупность фаз / Физика и техника высоких давлений, 2019. – Т. 29, № 4. – С. 40-47.

2020

1. S.V. Vasiliev, A.I. Limanovskii, V.M. Tkachenko, T.V. Tsvetkov, K.A. Svyrydova, V.V. Burkhovetskii, V.N. Sayapin, S.V. Terekhov, V.I. Tkatch, Fabrication of consolidated layered samples by high-pressure torsion processing of rapidly solidified Al-based ribbons with amorphous and crystalline structures / Materials Characterization, 2020. – V. 24, 101080. – P.P. 1-6.

2. Терехов С.В. Моно- и мультстадийная кристаллизация аморфных сплавов / Физика металлов и металловедение, 2020. – Т. 121, № 7. – С. 1-6 (Terekhov S.V. Single- and Multistage Crystallization of Amorphous Alloys / Physics of Metals and Metallography, 2020. – Vol. 121, No. 7. – P.P. 664–669.).

3. Терехов С.В. Термические изменения состояния металлических стекол / Физика и техника высоких давлений, 2020. – Т. 30, № 1. – С. 5-16.

4. Терехов С.В., Локтионов И.К. Тепловые изменения аморфных сплавов / Мониторинг: наука и технологии, 2020. – № 2 (44). – С. 87-91.

Другие труды

1. Неужели это я?! (Психологические тесты. Парапсихологические этюды и опыты. Системы совершенствования духа и тела). / Автор-составитель С.В. Терехов. – Волноваха: Ассоциация «Украинский диалог», 1993. – 116 с.

2. Терехов С.В. Неужели это я?! Я – часть ВСЕГО! (Психологические тесты. Парапсихологические этюды и опыты. Системы совершенствования духа и тела (издание второе: исправленное и дополненное)). – Донецк: Цифровая типография, 2018. – 374 с.

Автор: Терехов Сергей Владимирович,
д. ф.-м. н., доц.

Монография: Поиски научной истины. Том 3. Избранные научные труды. 2015-2020 годы. – Донецк: Цифровая типография, 2020. – 262 с.