УДК 536+515.1 DOI: 10.34824/VKNIIRAN.2020.3.3.016

КВАНТОВО-КИНЕТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕРАВНОВЕСНОЙ СЛОЖНОЙ СИСТЕМЫ

© Сайханов Муса Баудинович

Комплексный научно-исследовательский институт Российской академии наук имени Х. И. Ибрагимова, г. Грозный; лаборатория экспериментальных исследований; в.н.с., к. ф.-м. н. saikhanov_musa@mail.ru

Аннотация. На основе крупнозернистого квантования и топологической концепции связности предлагается единый подход для кинетического моделирования неравновесных сложных систем. На основе, обобщённого на нестационарный случай, принципа минимального производства энтропии вводится функционал кинетического действия, аналогичный функционалу действия в аналитической механике.

Ключевые слова: кинетическое моделирование, сложная система, слоистый энергетический спектр, кинетическая скорость производства энтропии, функция Грина, перекрытие энергетических зон, связность, плотность квантовых состояний.

QUANTUM-KINETIC MODELING OF A NON-EQUILIBRIUM COMPLEX SYSTEM

© Saikhanov Musa Baudinovich

Kh. Ibragimov Complex Institute of the Russian Academy of Sciences, Russian Federation, Grozny; experimental laboratory, leading researcher, PhD in physics, saikhanov_musa@mail.ru

Abstract. On the basis of coarse-grained quantization and the topological concept of connectivity, a unified approach is proposed for kinetic modeling of non-equilibrium complex systems. On the basis of the principle of minimum entropy production generalized to the non-stationary case, a kinetic action functional is introduced, which is similar to the action functional in analytical mechanics.

Key words: kinetic modeling, complex system, layered energy spectrum, kinetic rate of entropy production, Green's function, energy band overlap, connectivity, density of quantum states.

Как известно, кинетический аспект неравновесной системы вдали от равновесия впервые был рассмотрен Гленсдорфом и Пригожиным на основе термодинамической теории устойчивости [5, 9, 10]. В частности, важным результатом этой теории, в том числе, для кинетического моделирования высокотемпературной сверхпроводимости, является объяснение неравновесной природы возникновения диссипативных структур.

Крупнозернистое квантование неоднородного энергетического спектра неравновесной системы, под которым подразумевается неймановское разбиение на группы (слои) с неразличимыми уровнями, и перенесение идеи локального равновесия в пространство энергетических уровней её элементов, позволило модифицировать функционал полного производства энтропии. Затем удалось сформулировать принцип минимального производства энтропии для нестационарного случая на квантово-кинетическом уровне рассмотрения [8, 11, 12]. Этот принцип может быть успешно использован, прежде всего, для теоретического описания, сложных неравновесных систем, состоящих из взаимодействующих квазиравновесных или квазистационарных однородных подсистем [13, 14].

В частности, высокотемпературные сверхпроводники (ВТСП), представляющие в настоящее время большой научный и практический интерес, также относятся к классу сложных систем, поскольку энергетические спектры электронов в них являются неоднородными (слоистыми), что приводит к возникновению локально стационарных подсистем, кинетически взаимодействующих между собой [6, 17]. Поэтому при рассмотрении высокотемпературной сверхпроводимости очень важным является учёт её топологического аспекта [2].

Поскольку кинетическое моделирование как метод синергетического описания эволюции неравновесной сложной системы вдали от равновесия достаточно подробно рассмотрен в вышеуказанных работах [12-16], то в данной работе мы ограничимся рассмотрением тех его особенностей, которые представляют интерес с точки зрения возможности применения к ВТСП. Как известно, управляющее уравнение эволюции в случае релаксации неравновесной сложной системы к равновесному состоянию в термодинамическом представлении имеет вид следующего вариационного принципа [12]:

$$\delta(\delta_{X\dot{X}}P) = \delta\int_{t_1}^{t_2}\frac{\partial_{X\dot{X}}P}{\partial t}dt = \int_{t_1}^{t_2}\delta\partial_{tX\dot{X}}Pdt = 0, \qquad (1)$$

где $P = P(X_1^1,...,X_i^j,...,X_n^m,\dot{X}_1^1,...,\dot{X}_i^j,...,\dot{X}_n^m)$ - модифицированный, то есть проквантованный по энергетическим слоям функционал полного производства энтропии; $X_i^j = X_i^j(t)$, $\dot{X}_i^j = \dot{X}_i^j(t)$ – локальные по энергетической шкале параметры обобщенных термодинамических сил и скоростей их изменения; i, j – номера необратимого процесса и квазистационарной подсистемы; нижние индексы при частной производной под интегралом означают, что изменение P происходит через изменение X_i^j, $\dot{X}_i^j$; t_1, t_1 - моменты начала и конца нестационарной эволюции системы. Уравнение (1) получено исходя из геодезического характера временного изменения функционала избыточного производства энтропии,

$$\delta_{X\dot{X}}P = P - P^{st}, \qquad (2)$$

связанного с инерционностью необратимого процесса [10,15].

Для конкретной неравновесной системы его необходимо рассматривать с учетом ограничивающих условий, налагаемых на соответствующие локальные и глобальные параметры.

Примечательно, что вариационный принцип (1) аналогичен вариационному принципу наименьшего действия в аналитической механике, причем частная производная по времени $V_P = \partial_{tX\dot{X}} P$, т.е. скорость изменения полного производства энтропии, играет роль функции Лагранжа, но уже в качестве ключевой кинетической характеристики неравновесной сложной системы [3, 4]. Соответственно, интеграл в вариационном уравнении (1) имеет смысл кинетического действия

$$K = \int_{t_1}^{t_2} \partial_{tX\dot{X}} P(X, \dot{X}) dt = \int_{t_1}^{t_2} V_P(X, \dot{X}) dt, \qquad (3)$$

так что его можно записать в более компактном виде

$$\delta K = 0.$$

Далее, осуществляя вариационную процедуру в левой части уравнения (1), для скорости изменения полного производства энтропии V_P получаем уравнения аналогичные уравнениям Лагранжа, которые ради простоты запишем для случая $n = 1$:

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial V_P}{\partial \dot{X}^j} - \frac{\partial V_P}{\partial X^j} = 0, \qquad (4)$$

где $j = 1,...,m$ - номер квазистационарной подсистемы и соответствующего ей энергетического слоя неравновесной системы. Необходимо отметить, что, соотношения (4) имеют смысл только для нестационарного процесса в неравновесной системе, поскольку в случае стационарного состояния, в силу равенств $P = const$, $V_P = 0$ они обращаются в тождества. Кроме того, эти уравнения получены при условии, что число подсистем (энергетических слоёв) m в неравновесной системе на интервале времени $t_2 - t_1$ сохраняется. Однако, при интенсивных внешних воздействиях число подсистем в неравновесной системе может изменяться, так что необходимо учитывать также возможность изменения кинетического действия K за счет изменения индекса m, обусловленного, в свою очередь, изменением топологии гиперповерхности полного производства энтропии [12. 13. 15].

Поскольку из равенств (1) и (3) следует, что с термодинамической точки зрения кинетическое действие тождественно избыточному производству энтропии, обусловленному возмущающим воздействием, то в математическом смысле оно оказывается связанным с часто используемой в современной теоретической физике функцией Грина [7]. При этом избыточное производство энтропии для состояний вблизи стационарного состояния равно сумме первой и второй вариаций полного производства энтропии [16]:

$$\delta_{X\dot{X}} P = \delta P + \frac{1}{2}\delta^2 P. \qquad (5)$$

Рассмотрим сначала источник возмущающего воздействия на систему. Им может быть либо поток энтропии, поступающий извне в виде энергии и частиц в систему за единицу времени, либо потоки, возникшие в самой системе за счет других воздействий, (например, гравитационного или электрического полей, сжатия, химических реакций и т.д.). Эти воздействия могут приводить к росту энтропии в системе, в том числе, за счет необратимого перераспределения энергии и частиц по возможным квантовым состояниям. Причём, если скорость их поступления настолько велика, что они не успевают распределиться по существующим в системе состояниям, они образуют дополнительные квазистационарные состояния, в том числе, в виде диссипативных структур. Термодинамический критерий их возникновения определяется, как известно, равенством нулю избыточного производства энтропии, которое с учетом (5) можно записать в виде [16]:

$$\delta_{X\dot{X}} P = \delta P + 1/2\delta^2 P = 0, \tag{6}$$

и, следовательно,

$$-\delta P = 1/2\delta^2 P. \tag{7}$$

Знак минус перед первой вариацией в левой части равенства (7) означает, что мы имеем дело с избыточным производством энтропии, покинувшим систему. При этом оставшаяся часть избыточного производства энтропии $1/2\delta^2 P$ используется для формирования локальных стационарных динамических состояний, то есть диссипативных структур. Кинетическая устойчивость этих структур вдали от равновесия обеспечивается постоянством внешнего потока энтропии F^e, обусловленного, например, внешними градиентами температуры, давления и потенциала электрического поля. При возможных малых случайных (например, шумовых) отклонениях $\varepsilon(t)$ их суммарное воздействие на систему близко к нулю. В то же время они важны в процессе формирования диссипативных структур [1. 14].

Однако при изменении во времени поступающего в систему потока энтропии $F^e = F^e(t)$ она выходит из стационарного режима и равенства (6) и (7) перестают выполняться [16]. Избыточное производство энтропии уже не равно нулю и через локальные параметры $X_i^j(t)$, $\dot{X}_i^j(t)$ становится зависимыми от параметра времени t. Например, при увеличении приложенного к проводнику напряжения электрический ток в нём возрастет, что приводит также к росту джоулева тепла, часть которого передается в окружающую среду. Следовательно, с физической точки зрения избыточное производство энтропии (2), будучи функционалом влияния возмущающего воздействия $F^e(t)$, является интегральной функцией отклика на это возмущение. Если при этом под величиной $F^e(t)$ подразумевать суммарный поток энтропии, поступающий в момент времени t в систему, то в качестве дифференциальной характеристики отклика следует использовать скорость изменения полного производства энтропии $V_P = \partial_{tX\dot{X}} P$. Тогда соответствующее дифференциальное уравнение, выражающее указанную корреляцию между источником возмущения и системой можно записать в виде [16]:

$$\partial_{tX\dot{X}} P = F^e(t). \tag{8}$$

С физической точки зрения уравнение (8) соответствует сохранению энтропии, в момент времени t поступающей от источника в систему при нестационарном процессе.

Наличие в правой части (8) функции источника возмущения, а в левой функции влияния, позволяет ввести обобщенную функцию Грина G_P, свертка которой с функцией $F^e(t)$ приводит к явному выражению для вычисления полного производства энтропии [7]:

$$P(t) = \int_{\tau_0}^{\tau} G_P(t-\tau)F(\tau)d\tau, \qquad (9)$$

где τ_0 и τ - моменты времени, соответствующие стационарному и нестационарному состояниям системы. Легко видеть, что в качестве функции Грина в данном случае подходит $\delta-$функция, которая с учётом соотношений (8) и (9) приводит к верному равенству $P^{st} = P(\tau_0) = F(\tau_0)$ при переходе неравновесной сложной системы в стационарное состояние.

ЛИТЕРАТУРА

1. Анищенко В. С., Нейман А. В., Мосс Ф., Шиманский-Гайер Л. Стохастический резонанс как индуцированный шумом эффект увеличения степени порядка // Успехи физических наук. 1999. 169 (1). 7 с.
2. Воловик Г. Е. Экзотические переходы Лифшица в топологической материи // 2018. Успехи физических наук. 188 (1). 95 с.
3. Гантмахер Ф. Р. Лекции по аналитической механике. М.; Наука, 1966. 300 с.
4. Гельфанд И. М., Фомин С. В. Вариационное исчисление. М.: ФИЗМАТЛИТ, 1961. 228 с.
5. Гленсдорф П., Пригожин И. Термодинамическая теория структуры, устойчивости и флуктуаций. М.: Едиториал УРСС, 2003. 280 с.
6. Москаленко В. А., Полистрант М. Е., Вакалюк В.М. Высокотемпературная сверхпроводимость на основе учёта особенностей электронного энергетического спектра // Успехи физических наук. 1991. 161 (8). 155 с.
7. Мэтьюз Дж., Уокер Р. Математические методы физики. М.: АТОМИЗДАТ, 1972. 397 с.
8. Нейман И. Математические основы квантовой механики. М.: Наука, 1964. 368 с.
9. Николис Г., Пригожин И. Познание сложного. М.: Мир, 1990. 358 с.
10. Пригожин И. От существующего к возникающему. М.: Наука, 1985. 217 с.
11. Пуанкаре А. О науке. М.: Наука, 1990. 736 с.
12. Сайханов М. Б. Моделирование необратимых процессов в неизотермических системах // Теплофизика высоких температур. 2006. 44 (6). 877 с.
13. Сайханов М. Б. О некоторых топологических свойствах кинетического моделирования неравновесной системы // Вестник Московского университета. Сер. Физ. Астр., 2012. №1. 34 с.
14. Сайханов М.Б., Гагаева З.Ш. Кинетическое моделирование сложных систем // Динамика сложных систем. 2016. Т. 10, №2. 44 с.
15. Сайханов М. Б. Топологическая природа инерционности неравновесной системы вдали от равновесия // Теоретическая и математическая физика. 2017. 191 (1). 116 с.

16. Сайханов М. Б. Кинетическое моделирование диссипативных структур// Нелинейный мир. 2013. №1. 44 с.
17. Элиашберг Г. М. Носители тока и магнетизм в высокотемпературных сверхпроводниках // Успехи физических наук. 1989. 158 (2). 343 с.

REFERENCES

1. Anishenko V.S., Neiman A.V., Moss F., Shimansky-Gayer L. Stochastic resonance as a noise-induced effect of increasing the degree of order // Uspekhi fizicheskikh nauk. 1999. 169 (1). 7 p.
2. Volovik G.E. Exotic Lifshitz transitions in topological matter // Uspekhi fizicheskikh nauk. 2018. 188 (1). 95 p.
3. Gantmakher F.R. Lectures on analytical mechanics. M.: Nauka, 1966. 300 p.
4. Gel'fand I. M., Fomin S.V. Calculus of variations. M.: FIZMATLIT, 1961. 228 p.
5. Glensdorf P., Prigogine I. Thermodynamic structure of stability and fluctuations. M.: Editorial URSS, 2003. 280 p.
6. Moskalenko V. A., Polistrant M. E., Vakalyuk V.M. High-temperature superconductivity based on taking into account the features of the electronic energy spectrum // Uspekhi fizicheskikh nauk. 1991. 161 (8). 155 p.
7. 7. Matthews J., Walker R. Mathematical methods of physics. M.: ATOMIZDAT, 1972. 397 p.
8. Neiman I. Mathematical foundations of quantum mechanics. M.: Nauka, 1964. 368 p.
9. 9. Nicolis G., Prigogine I. Knowledge of the Complex. M.: Mir, 1990. 358 p.
10. 10. Prigogine I. From existing to emerging. M.: Nauka, 1985. 217 p.
11. 11. Poincare A. On Science. M.: Nauka, 1990. 736 p.
12. Saikhanov M. B. Modeling of irreversible processes in non-isothermal systems // High Temperature Thermal Physics. 2006. 44(6). 877 p.
13. Saikhanov M. B. On some topological properties of kinetic modeling of a non-equilibrium system // 2012 / Vestnik Mosk. Univ. Ser. 3. Phys. Astr., № 1. 34 p.
14. Saikhanov M. B, Gagaeva Z. Sh. Kinetic modeling of complex systems // Dynamic of Complex Systems. 2016. 10(2). 44 p.
15. Saikhanov M.B. The topological nature of the inertia of a non-equilibrium system far from equilibrium // Theoretical and mathematical physics. 2017. 191 (1). 116 p.
16. Saikhanov M. B. Kinetic modeling of dissipative structures // Nonlinear World. 2013. No.1. 44 p.
17. Eliashberg G.M. Current carriers and magnetism in high-temperature superconductors // Uspekhi fizicheskikh nauk. 1989. 158 (2). 343 p.