

# Моделирование процессов теплопроводности и диффузии в технологиях получения и обработки материалов с использованием интенсивных источников энергии

М. М. Якупкин

---

Предложена полуфеноменологическая модель процессов переноса под действием интенсивных источников энергии. Для объяснения наблюдаемых экспериментально отклонений линейной реакции системы на внешнее возмущение в процессах переноса, возникающих под действием интенсивных потоков энергии, предложено учесть влияние инерции среды. Полуфеноменологическая модель процессов сведена к системе с двумя базисными состояниями, для решения которой использованы методы, разработанные в теории микробиъектов. Показано, что инерция среды обусловлена конечным временем установления равновесия между базисными состояниями.

**Ключевые слова:** перенос тепла, диффузия, релаксация, лазерное и электронное облучение.

---

Semi-phenomenological model of the transfer processes under the action of power energy sources has been proposed. To explain the experimentally observed deviations of the linear system response to external perturbation in the transport processes occurring under the action of intense energy fluxes, it is proposed to take into account the influence of mass media. Semiphenomenological process model is reduced to a system with two basis states, for which decision to use the techniques in the theory of microscopic objects. It is shown that the inertia of the medium due to the finite time to establish equilibrium between the basis states.

**Keywords:** heat transfer, diffusion, relaxation, laser and electron irradiation.

---

## Введение

В связи с развитием технологий получения и обработки новых материалов, основанных на использовании интенсивных потоков энергии [1–3], возникает проблема учета инерции среды на процессы переноса, то есть описания этих процессов за пределами гидродинамической шкалы при нарушении принципа локального квазиравновесия. В последнее время интерес к этой проблеме возрос в связи с использованием излучения лазеров с пико- и фемтосекундной длительностью импульсов для исследования процесса переноса тепла в пленках и тонкослойных структурах [4–6].

Считают [4–10], что при полуфеноменологическом подходе проблема может быть решена путем введения в выражение для потока малого времени  $\tau$ ,

характеризующее эффект релаксации на мелко-масштабной временной шкале, и перехода к уравнению переноса гиперболического типа. Хотя такой способ учета инерции среды известен достаточно давно, его применение приводит к потере законов сохранения [11]. Вследствие этого характер получаемых решений никак не определен.

Причина возникающих трудностей состоит в том, что в отличие от микроскопического подхода, при котором быстрые временные флуктуации в масштабе гидродинамической шкалы усредняются и исключаются из рассмотрения [12], в уравнении переноса гиперболического типа обе временные шкалы — крупномасштабная и мелкомасштабная участвуют в описании процесса переноса равноправно. Уравнение непрерывности, которое используется для перехода от релаксационного выражения

для потока [13] к уравнению переноса гиперболического типа, как закон сохранения выдерживает отнюдь не любую зависимость потока от времени. Способ устранения этих трудностей в настоящее время хорошо известен. Он использует различие между решениями уравнения второго порядка и связанного с ним уравнения первого порядка с матричными коэффициентами такого, чтобы каждая из компонент этого решения удовлетворяла исходному уравнению.

Цель работы состояла в моделировании влияния инерции среды на процессы переноса, протекающие под действием интенсивных потоков энергии.

### Индивидуальные процессы переноса

Для построения модели используем координатное представление. Для простоты ограничимся случаем процесса переноса тепла (массы) в твердых телах, а чтобы уменьшить число размерных переменных, используем вероятностную трактовку решения. Тогда полуфеноменологическое уравнение переноса, дающее сокращенное описание этих процессов в суперпозиционном состоянии  $\langle \mathbf{n} | = n_1 \langle 1 | + n_2 \langle 2 |$  [14], имеет вид

$$\frac{\partial \mathbf{n}}{\partial t} = \mathbf{Hn}, \quad \mathbf{H} = \mathbf{\Gamma} - \mathbf{V} \frac{\partial}{\partial x},$$

$$\mathbf{\Gamma} = \mathbf{\Gamma} \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{V} = V_0 \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{n} = \begin{pmatrix} n_1(t, x) \\ n_2(t, x) \end{pmatrix}, t \geq 0, \quad (1)$$

где  $n_{1,2}(t, x)$  — плотность вероятности нахождения системы в состояниях  $\langle 1 |$  и  $\langle 2 |$ ,  $\mathbf{\Gamma}$  — частота переходов системы между состояниями,  $V_0 = (B/\tau)^{1/2}$  — предельная скорость переноса,  $\tau = 1/2\mathbf{\Gamma}$ ,  $B = (a, D)$  — кинетические коэффициенты температуропроводности и диффузии.

В нем наличие недиагональных элементов матричных коэффициентов означает существование переходов системы между различными базисными состояниями. Отметим, что равенство недиагональных элементов матричных коэффициентов в (1) и равенство (или комплексная сопряженность) недиагональных элементов гамильтоновой матрицы имеет тот же физический смысл — вероятность пребывания системы хотя бы в одном из базисных состояний  $N_{1,2}(t)$  не должна меняться со временем.

Чтобы перейти к энтропийному представлению, выделим матрицы скорости  $\mathbf{V}$  и кинетического

баланса  $\mathbf{\Gamma}$  и запишем (1) в виде уравнения непрерывности

$$\mathbf{n}'_t + (\mathbf{Vn})'_x = \mathbf{\Gamma n}. \quad (2)$$

Сделав замену  $d\mathbf{s} = Gd\mathbf{n}$ , приведем (2) к уравнению непрерывности для вектор-функции  $\mathbf{s} = \mathbf{s}(t, x)$

$$\mathbf{s}'_t + (\mathbf{Vs})'_x = \mathbf{\sigma s}, \quad \mathbf{\sigma} = \mathbf{\Gamma} + X_i \mathbf{V}, \quad (3)$$

где  $G = (T^{-1}, -\mu/T)$  — термодинамический множитель, с помощью которого устанавливается связь между тепловым (диффузионным) процессом и плотностью энтропии,  $X_i = (\ln|G_i|)'_x$  — термодинамическая сила,  $T$  — температура,  $\mu$  — химический потенциал диффундирующего компонента.

Выполнив в (3) преобразование Фурье по переменной  $x$ , перейдем к уравнению для вектор-функции  $\hat{\mathbf{s}}(t, \zeta)$ . Положив в нем  $\zeta = 0$  и обозначив  $\mathbf{S}(t) = \hat{\mathbf{s}}(t, 0)$ , для интегрального изменения вектор-функции  $\mathbf{\sigma}(t, x)$  получим уравнение, которое описывает процесс (1) в энтропийном представлении

$$\dot{\mathbf{S}} = \mathbf{\sigma S}, \quad (4)$$

где  $\mathbf{\sigma}$  — источник энтропии процесса в суперпозиционном состоянии  $\langle \mathbf{S} | = S_1 \langle 1 | + S_2 \langle 2 |$ ,  $X = (\ln|G|)'_x$  — термодинамическая сила,  $G = (T^{-1}, -\mu/T)$  — термодинамические множители теплового и диффузионного процессов.

Считаем, что уравнение (1) описывает переходы между состояниями  $\langle 1 |$  и  $\langle 2 |$ , которым можно привести в соответствие процессы, протекающие на крупномасштабной и мелкомасштабной временных шкалах. Для описания этих процессов, перейдем к стационарным базисным состояниям, у которых переходы системы между различными базисными состояниями отсутствуют. При этом система, находящаяся в одном из стационарных состояний, уже не может быть обнаружена в другом. Выполнив для этого каноническое преобразование  $\mathbf{H} = \mathbf{U}_n \mathbf{L} \mathbf{U}_n^{-1}$ ,  $\mathbf{\sigma} = \mathbf{U}_s \mathbf{L} \mathbf{U}_s^{-1}$  и обозначив  $\mathbf{n}_{st} = \mathbf{U}_n^{-1} \mathbf{n}$ ,  $\mathbf{S}_{st} = \mathbf{U}_n^{-1} \mathbf{S}$ , для состояний  $\langle 1 |$  и  $\langle 2 |$ , получим

$$\frac{\partial \mathbf{n}_{st}}{\partial t} = \mathbf{L n}_{st}, \quad (5)$$

$$\mathbf{n}_{st} = \begin{pmatrix} n_-(t, x) \\ n_+(t, x) \end{pmatrix}; \quad \mathbf{L}_i = \begin{pmatrix} \hat{L}_- & 0 \\ 0 & \hat{L}_+ \end{pmatrix},$$

$$\hat{L}_{\mp} = -\mathbf{\Gamma} \left( 1 \mp \sqrt{1 + (h \partial / \partial x)^2} \right), \quad h = \frac{V_0}{\mathbf{\Gamma}},$$

$$\dot{\mathbf{S}}_{st} = \mathbf{\Omega S}_{st}, \quad (6)$$

$$\mathbf{S}_{st} = \begin{pmatrix} S_+(t) \\ S_-(t) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{\Omega}_i = \begin{pmatrix} \Omega_+ & 0 \\ 0 & \Omega_- \end{pmatrix},$$

$$\Omega_{\pm} = \Gamma \left( -1 \pm \sqrt{1 + (hX)^2} \right).$$

Уравнения (5), (6) описывают необратимый процесс в стационарном состоянии  $\langle \mathbf{n}_{st} | = n_- \langle \mathbf{I} | + n_+ \langle \mathbf{II} |$ ,  $\langle \mathbf{S}_{st} | = S_+ \langle \mathbf{I} | + S_- \langle \mathbf{II} |$  для координатного и энтропийного представления, соответственно. Они позволяют рассматривать макроскопический и микроскопический процессы как единый флуктуационно-диссипационный процесс, в котором в зависимости от выбора масштаба временной шкалы проявляются флуктуационные или диссипационные свойства процесса. В них выполнение законов сохранения тепла (массы) и энтропии для системы, находящейся в состоянии термодинамического равновесия ( $X = 0$ )

$$\int_{-\infty}^{\infty} (n_1(t, x) + n_2(t, x)) dx = \int_{-\infty}^{\infty} n_-(t, x) dx = 1, \quad (7)$$

$(S_+(t) + S_-(t)) = S_+$ ,  $\dot{S}_+ = 0$  обеспечивает матрица  $\mathbf{\Gamma}$  кинетического баланса. Действительно, обозначив  $\boldsymbol{\psi}$  — Фурье-образ вектор-функций  $\hat{\mathbf{n}}(t, \zeta)$  при  $\zeta = 0$  и  $\mathbf{S}(t, X)$  при  $X = 0$ , будем иметь  $d\boldsymbol{\psi} / dt = \mathbf{\Gamma}\boldsymbol{\psi}$ . Отсюда получим равенство, из которого следуют законы сохранения (7).

$$\boldsymbol{\psi}(t) = \exp(\mathbf{\Gamma}t)\boldsymbol{\psi}_0 = (\mathbf{P}\exp(\mathbf{R}t))\boldsymbol{\psi}_0^{\text{st}},$$

$$\boldsymbol{\psi}_0^{\text{st}} = \mathbf{P}^{-1}\boldsymbol{\psi}_0,$$

где  $\boldsymbol{\psi}_0$ ,  $\boldsymbol{\psi}_0^{\text{st}}$  — начальные условия для вектор-функций  $\boldsymbol{\psi}(t)$  и  $\boldsymbol{\psi}_{\text{st}}$  в суперпозиционном и стационарном состояниях, соответственно,  $\mathbf{R}$  — диагональная форма матрицы  $\mathbf{\Gamma}$ ;  $\mathbf{P}$ ,  $\mathbf{P}^{-1}$  — матрица собственных векторов и обратная ей.

Решения  $n_{\pm}(t, x)$  и  $S_{\pm}(t)$  для стационарного состояния  $\langle \mathbf{II} |$  на мелкомасштабной временной шкале не участвуют в законах сохранения (7) и являются ненаблюдаемыми в эксперименте.

Чтобы выявить роль метрики, рассмотрим процессы на крупномасштабной временной шкале в стационарном состоянии  $\langle \mathbf{I} |$ . Используя для скорости переноса соотношение  $V = d\Omega_+ / dX$ , получим

$$V = V_0 \left( \frac{hX}{\sqrt{1 + (hX)^2}} \right),$$

то есть в состоянии  $\langle \mathbf{I} |$  процесс переноса протекает на прямолинейных траекториях  $x = Vt$  и лишь на них имеет предельное значение  $V_0, (X \rightarrow \infty)$ . В эксперименте более характерными являются траектории вида  $x = o(\sqrt{t})$  или близкие к ним. Так как основной вклад в решение (5) дают первые члены разложения

$$\text{оператора в ряд } \hat{L}_- \approx B\partial_x^2 - \tau(B\partial_x^2)^2,$$

то результаты исследования отклонений от гидродинамического описания процессов переноса под действием интенсивных потоков энергии позволяют экспериментально обосновать влияние мелкомасштабных процессов и определить частоту  $\Gamma = 1/2\tau$  перехода системы между базисными состояниями  $\langle \mathbf{1} |$  и  $\langle \mathbf{2} |$ .

Другая ситуация возникает для мелкомасштабного процесса, протекающего в стационарном состоянии  $\langle \mathbf{II} |$ . Оно устанавливает границу применимости законов сохранения и второго закона термодинамики. Необратимый процесс, протекающий в состоянии  $\langle \mathbf{II} |$ , зеркально отслеживает процесс, протекающий в состоянии  $\langle \mathbf{I} |$ . Хотя этот процесс не наблюдается, устранить его по физическому смыслу нельзя — решения для обоих состояний равноправны, ограничены и ведут себя одинаково при  $t \rightarrow \infty$ . Однако процесс в состоянии  $\langle \mathbf{II} |$  идет с убылью энтропии и является обратным диссипационному. Величина  $\Omega_- = -2\Gamma$  определяет размер “щели”, разделяющий состояния с положительными и отрицательными значениями  $\Omega$ . В стационарном состоянии  $\langle \mathbf{II} |$  система является открытой и находится в контакте с термостатом, воздействие которого на систему индуцирует возникновение флуктуаций. Тем самым проявляется одна из особенностей подхода [14], согласно которому мелкомасштабный процесс подобно микрообъекту нельзя рассматривать изолированно, исключая его взаимодействие с окружающей средой.

Отметим, что решения  $n_{1,2}(t, x)$  и  $n_{\mp}(t, x)$  (в общем случае любая компонента вектор-функции  $\mathbf{n}$  независимо от её поворота) удовлетворяют уравнению гиперболического типа

$$\hat{L}n_{1,2} = 0, \quad \hat{L} = \tau\partial^2 / \partial t^2 + \partial / \partial t - B\partial^2 / \partial x^2.$$

Таким образом, даже если пренебречь тем обстоятельством, что в этом уравнении отсутствует закон сохранения, число возможных его решений слишком велико, чтобы оно могло описывать зависимость, наблюдаемую в эксперименте. Никаких колебательных процессов в локально-неравновесных системах эти решения не описывают.

### Связанные процессы переноса

До настоящего времени учет инерции среды проводился в основном для индивидуальных процессов переноса. Первая и, по-видимому, единственная работа [15], в которой рассматривались процессы переноса с учетом перекрестных эффектов, основана на энтропийном представлении этих процессов с использованием релаксационного выражения для потока [13] и формализме теории необратимых процессов, разработанным для гидродинамической шкалы. Поэтому при переходе от энтропийного к координатному представлению происходит потеря законов сохранения.

Чтобы обеспечить выполнение законов сохранения, используем координатное представление, которое при правильном выборе элементов матричных коэффициентов должно приводить к представлению энтропийного источника на гидродинамической шкале в виде квадратичной формы термодинамических сил (потоков) [16]. Для простоты ограничимся случаем связанных процессов переноса тепла 1 и массы 2 в твердых телах. Тогда полуфеноменологическое уравнение переноса, дающее сокращенное описание этих процессов в суперпозиционном состоянии, имеет вид

$$\frac{\partial \mathbf{n}}{\partial t} = \mathbf{Hn}, \quad \mathbf{n} = \mathbf{n}(t, x), \quad t \geq 0, \quad (8)$$

где  $\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \mathbf{H}_{11} & \mathbf{H}_{12} \\ \mathbf{H}_{21} & \mathbf{H}_{22} \end{pmatrix}$  — дифференциальный матричный оператор блочного типа,

$$\mathbf{H}_{ij} \left( \frac{\partial}{\partial x} \right) = \Gamma_{ij} - \mathbf{V}_{ij} \frac{\partial}{\partial x},$$

$$\mathbf{n} = \begin{pmatrix} \mathbf{n}_1 \\ \mathbf{n}_2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{n}_i = \begin{pmatrix} n_1(t, x) \\ n_2(t, x) \end{pmatrix}_i,$$

$$\mathbf{V}_{ij} = V_0^{(ij)} \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\Gamma_{ij} = \Gamma_{ij} \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad i = j,$$

$$\Gamma_{ij} = 0, \quad i \neq j, \quad (i, j) = 1, 2,$$

$\mathbf{n}_i$  — двухкомпонентная вектор-функция, описывающая процессы 1 и 2,  $\mathbf{H}_{ij}$  — блок-элементы оператора  $\mathbf{H}$ , диагональные элементы которого  $i = j$  описывают изолированные процессы переноса, недиагональные — перекрёстные эффекты;

$$V_0^{(ij)} = \left( \frac{B_{ij}}{\tau_i} \right)^{1/2} \quad \text{— не зависящая от внешнего возму-}$$

щения предельная скорость переноса,  $\tau_i = (2\Gamma_{ii})^{-1}$  — малое время, характеризующее мелкомасштабную шкалу,  $B_{ij}$  — кинетические коэффициенты, измеренные в квазиравновесных условиях эксперимента для диагональных (индивидуальных) ( $i = j$ ) и недиагональных (перекрестных) ( $i \neq j$ ) процессов.

Переход к энтропийному представлению аналогичен описанному для индивидуальных процессов. Выделяя матрицы скорости  $\mathbf{V}$  и кинетического баланса  $\mathbf{\Gamma}$  переходим к уравнению непрерывности

$$\mathbf{n}'_t + (\mathbf{Vn})'_x = \mathbf{\Gamma n} \quad (9)$$

и, сделав замену  $d\mathbf{s} = \mathbf{G}d\mathbf{n}$ , приводим (9) к уравнению непрерывности для вектор-функции  $\mathbf{s} = \mathbf{s}(t, x)$

$$\mathbf{s}'_t + (\bar{\mathbf{V}}\mathbf{s})'_x = \boldsymbol{\sigma}\mathbf{s}, \quad \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{\Gamma} + \mathbf{X}\bar{\mathbf{V}}, \quad (10)$$

где  $\mathbf{X} = \begin{pmatrix} \mathbf{X}_1 & 0 \\ 0 & \mathbf{X}_2 \end{pmatrix}$ ,  $\mathbf{G} = \begin{pmatrix} \mathbf{G}_1 & 0 \\ 0 & \mathbf{G}_2 \end{pmatrix}$  — диагональные матрицы блочного типа термодинамических сил и термодинамического множителя, соответственно,

$$\mathbf{X}_i = \begin{pmatrix} X_i & 0 \\ 0 & X_i \end{pmatrix}, \quad \mathbf{G}_i = \begin{pmatrix} G_i & 0 \\ 0 & G_i \end{pmatrix},$$

$$\bar{\mathbf{V}} = \mathbf{G}\mathbf{V}\mathbf{G}^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{V}_{11} & g_{12}\mathbf{V}_{12} \\ g_{21}\mathbf{V}_{21} & \mathbf{V}_{22} \end{pmatrix},$$

$X_i = (\ln |G_i|)'_x$  — термодинамическая сила,  $G_1 = T^{-1}$ ,  $G_2 = -\mu/T$  — термодинамические множители, с помощью которых устанавливается связь между изменениями физического свойства и плотности энтропии,  $g_{ij} = g_{ji}^{-1} = (G_i/G_j)$ ,  $T$  — температура,  $\mu$  — химический потенциал диффундирующего компонента.

Выполнив преобразование Фурье по переменной  $x$ , перейдем к уравнению для вектор-функции  $\mathbf{s}(t, \zeta)$ . Положив в нем  $\zeta = 0$  и обозначив  $\mathbf{S}(t) = \mathbf{s}(t, 0)$ , для интегрального изменения вектор-функции  $\mathbf{s}(t, x)$  получим уравнение, которое описывает процесс (8) в энтропийном представлении

$$d\mathbf{S}/dt = \boldsymbol{\sigma}\mathbf{S}, \quad (11)$$

где  $\boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma}_{11} & \boldsymbol{\sigma}_{12} \\ \boldsymbol{\sigma}_{21} & \boldsymbol{\sigma}_{22} \end{pmatrix}$  — зависящий от термодинамических сил  $X_i$  матричный оператор источника энтропии в суперпозиционном состоянии;  $\mathbf{S} = \begin{pmatrix} \mathbf{S}_1 \\ \mathbf{S}_2 \end{pmatrix}$ ,

$$\mathbf{S}_i = \begin{pmatrix} S_1(t) \\ S_2(t) \end{pmatrix}_i, \quad i = 1, 2. \text{ Здесь выражения для блок-}$$

элементов оператора  $\sigma$  имеют вид  $\sigma_{ij} = (\Gamma_{ii} + X_i V_{ij})$ ,

( $i=j$ ) и  $\sigma_{ij} = g_{ij} X_i V_{ij}$ , ( $i \neq j$ ).

Так как законы сохранения тепла и массы должны выполняться независимо, то для того, чтобы из множества математически допустимых решений уравнений (8) и (11) выделить те, которые им удовлетворяют, на недиагональные блоки налагаем условия

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{ij} \mathbf{n}_j - \mathbf{H}_{ji} \mathbf{n}_i &= 0, \\ \sigma_{ij} \mathbf{S}_j - \sigma_{ji} \mathbf{S}_i &= 0, \quad i \neq j. \end{aligned} \quad (12)$$

Они приводят к распадению уравнений на два для двухкомпонентных вектор-функций  $\mathbf{n}_i(t, x)$  и  $\mathbf{S}_i(t)$ , которые описывают суперпозиционное состояние системы  $\langle \mathbf{n}_i | = n_1^{(i)} \langle 1 | + n_2^{(i)} \langle 2 |$  и  $\langle \mathbf{S}_i | = S_1^{(i)} \langle 1 | + S_2^{(i)} \langle 2 |$ ,

$$\frac{\partial \mathbf{n}_i}{\partial t} = \mathbf{H}_i \mathbf{n}_i, \quad (13a)$$

$$\mathbf{n}_i = \begin{pmatrix} n_1^{(i)}(t, x) \\ n_2^{(i)}(t, x) \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{H}_i = \Gamma_{ii} \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} - (V_0^{(ii)} + V_0^{(ji)}) \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x},$$

$$\frac{d\mathbf{S}_i}{dt} = \sigma_i \mathbf{S}_i, \quad (13b)$$

$$\mathbf{S}_i = \begin{pmatrix} S_1^{(i)}(t) \\ S_2^{(i)}(t) \end{pmatrix},$$

$$\sigma_i = \Gamma_{ii} \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} + (X_i V_0^{(ii)} + g_{ji} X_j V_0^{(ji)}) \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

где  $n_{1,2}^{(i)}(t, x)$  — плотность вероятности нахождения системы в состояниях  $\langle 1 |$  и  $\langle 2 |$ ,  $S_{1,2}^{(i)}(t)$  — интегральное изменение энтропии в этих состояниях,  $\sigma_i$  — оператор источника энтропии в суперпозиционном состоянии. Отметим, что вероятностная трактовка решения приводит к размерности энтропийного источника и термодинамических сил  $\text{с}^{-1}$  и  $\text{см}^{-1}$ , соответственно, независимо от процесса 1 или 2, что позволяет упростить вид полученных выражений.

При выборе индексов  $i = 1, j = 2$  уравнения (13) описывают перенос тепла под действием тепловой силы  $X_1 = (\ln T^{-1})'_x$  и стимулированный переносом

массы тепловой процесс под действием химической

силы  $X_2 = (\ln |-\mu/T|)'_x$ . При выборе индексов  $i = 2, j = 1$  — перенос массы под действием силы  $X_2$  и стимулированный при переносе тепла диффузионный процесс под действием силы  $X_1$ .

Следуя [15], считаем, что уравнения (13) описывают переходы между состояниями  $\langle 1 |$  и  $\langle 2 |$ , которым можно привести в соответствие два процесса, протекающие на разной временной шкале. Для описания этих процессов, перейдем к стационарным базисным состояниям  $\langle \mathbf{n}_{st}^i | = n_-^{(i)} \langle 1 | + n_+^{(i)} \langle 2 |$ . Выполнив для этого каноническое преобразование  $\mathbf{H}_i = \mathbf{U}_n \mathbf{L}_i \mathbf{U}_n^{-1}$ ,  $\sigma_i = \mathbf{U}_s \mathbf{L}_i \mathbf{U}_s^{-1}$  и обозначив  $\mathbf{n}_{st}^{(i)} = \mathbf{U}_n^{-1} \mathbf{n}_i$ ,  $\mathbf{S}_{st}^{(i)} = \mathbf{U}_s^{-1} \mathbf{S}_i$ , получим

$$\frac{\partial \mathbf{n}_{st}^{(i)}}{\partial t} = \mathbf{L}_i \mathbf{n}_{st}^{(i)}, \quad (14)$$

$$\mathbf{n}_{st}^{(i)} = \begin{pmatrix} n_-(t, x) \\ n_+(t, x) \end{pmatrix}_i, \quad \mathbf{L}_i = \begin{pmatrix} \hat{L}_- & 0 \\ 0 & \hat{L}_+ \end{pmatrix}_i,$$

$$\hat{L}_\mp^{(i)} = -\Gamma_{ii} \left( 1 \mp \sqrt{1 + \left( (h_i + h_{ji}) \frac{\partial}{\partial x} \right)^2} \right),$$

$$h_i = \frac{V_0^{(i)}}{\Gamma_{ii}}, \quad h_{ji} = \frac{V_0^{(ji)} g_{ji}}{\Gamma_{ii}}, \quad (14a)$$

$$\dot{\mathbf{S}}_{st}^{(i)} = \mathbf{\Omega}_i \mathbf{S}_{st}^{(i)}, \quad (15)$$

$$\mathbf{S}_{st}^{(i)} = \begin{pmatrix} S_+(t) \\ S_-(t) \end{pmatrix}_i, \quad \mathbf{\Omega}_i = \begin{pmatrix} \Omega_+ & 0 \\ 0 & \Omega_- \end{pmatrix}_i,$$

$$\Omega_\pm^{(i)} = \Gamma_{ii} \left( -1 \pm \sqrt{1 + (h_i X_i + h_{ji} X_j)^2} \right), \quad (15a)$$

где  $\mathbf{U}_{n,s}$  — унитарный оператор,  $\mathbf{\Omega}_i$  — оператор источника энтропии в стационарном состоянии,  $\Omega_\pm^{(i)}$  — выражения для источника энтропии на крупномасштабной и мелкомасштабной временных шкалах для теплового  $i = 1$  и диффузионного  $i = 2$  процессов, соответственно.

В уравнениях (12) – (14) выполнение законов сохранения тепла (массы)

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} (n_1(t, x) + n_2(t, x))_i dx = \\ & = \int_{-\infty}^{\infty} n_-^{(i)}(t, x) dx = 1 \end{aligned} \quad (16a)$$

и энтропии (для системы, находящейся в состоянии термодинамического равновесия  $(X_i, X_j) = 0$ )

$$(S_+(t) + S_-(t))_i = S_+^{(i)}, \quad \dot{S}_+^{(i)} = 0 \quad (16б)$$

в суперпозиционном  $\langle 1 |$  и  $\langle 2 |$  и стационарном  $\langle I |$  состояниях обеспечивает матрица  $\Gamma = \Gamma_{ii}$  кинетического баланса.

Как и для индивидуальных процессов, решения  $n_+^{(i)}(t, x)$  и  $S_-^{(i)}(t)$  для стационарного состояния  $\langle \Pi |$  на мелкомасштабной временной шкале, для которых не выполняются законы сохранения, не участвуют в законах сохранения (16) и поэтому являются ненаблюдаемыми в эксперименте.

Так как процессы в состоянии  $\langle I |$  протекают на прямолинейных траекториях  $x = Vt$ ,  $V \in [0, V_0^{(i)}]$ , где

$V_0^{(i)}$  — предельная скорость переноса, то возникает вопрос о переходе на гидродинамическую шкалу, на которой траектории имеют вид  $o(\sqrt{t})$ . Для этого, ограничиваясь в выражениях (14а) и (15а) первыми членами разложения корня в ряд, опишем кинетику процесса для состояния  $\langle I |$  в виде

$$\frac{\partial n_-^{(i)}}{\partial t} = (\hat{L}_-^g + \dots)n_-^{(i)}, \quad \hat{L}_-^g = B_i \frac{\partial^2}{\partial x^2},$$

$$B_i = 0,5 \Gamma_{ii} (h_i + h_{ji})^2, \quad (17а)$$

$$\frac{dS_+^{(i)}}{dt} = (\Omega_i^g + \dots)S_+^{(i)},$$

$$\Omega_i^g = B_{ii}X_i^2 + b_{ij}X_iX_j, \quad b_{ij} = \Gamma_{ii}h_{ii}h_{ji}, \quad (17б)$$

где члены  $\hat{L}_-^g$  и  $\Omega_i^g$  дают гидродинамическое приближение процессов переноса, следующие члены разложения — описывают влияние инерции среды.

Отсюда видно различие между координатным и энтропийным представлениями при описании процессов переноса. Так как законы сохранения тепла и массы выполняются независимо, то влияние перекрёстных членов в (17а) сводится лишь к изменению (незначительному в силу малости перекрёстных эффектов) кинетических коэффициентов. Другая ситуация возникает для представления (17б). Энтропия системы возрастает независимо при протекании теплового, диффузионного и перекрёстных процессов. В результате для суммарного процесса получаем известное выражение энтропийного источника [16]

$$\Omega_g = \Omega_1^g + \Omega_2^g = B_{11}X_1^2 +$$

$$+ (b_{12} + b_{21})X_1X_2 + B_{22}X_2^2$$

в виде квадратичной формы термодинамических сил, где  $b_{12} = b_{21}$ .

## Выводы

1. Предложена полуфеноменологическая модель процессов переноса под действием интенсивных источников энергии, позволяющая выйти за пределы гидродинамического приближения путем учета инерции среды на внешнее возмущение.

2. Модель основана на предположении о возможности существования системы в двух базисных состояниях — суперпозиционном и стационарном, при этом флуктуационная и диссипационная составляющие процессов рассматриваются как единый процесс, в котором они являются компонентами вектора состояния.

3. Показано, что наблюдаемые экспериментально отклонения от линейной реакции среды на внешнее возмущение можно связать с инерцией мелкомасштабных (флуктуационных) процессов.

4. Показано, что при учете инерции среды уравнения переноса, удовлетворяющие закону сохранения, имеют вид системы дифференциальных уравнений первого порядка с двумя базисными состояниями.

5. Найден поправки в классические уравнения и выражения для потока, позволяющие рассчитать влияние степени неравновесности среды на процессы переноса.

## Литература

1. Физика высоких плотностей энергии. Под ред. Г. И. Кальдипоры и Г. М.Кнопфеля. М.: Мир, 1974, 484 с.
2. Ivanov L.I., Platov Yu.M. Radiation physics of metals and its applications. Cambridge International Science Publishing, 2004, 356 p.
3. Бушман А.В., Канель Г.И., Ни А.П., Фортов В.Е. Теплофизика и динамика импульсных воздействий. Черноголовка: ОИИФ АН СССР, 1988, 200 с.
4. Saidane A., Pulko S.H. High-power short-pulse laser heating of low dimensional structures: a hyperbolic heat conduction study using TLM. Microelectronic Engineering. 2000, v. 51 – 52, no. 1, p. 469 – 478.
5. Pamela M., Caffrey A.P., Stevens R.J., Klopff J.M., McLeskey J., Smith A.N. Femtosecond pump–probe nondestructive examination of materials. Rev. of Scientific Instruments. 2003, v. 74, no. 1, p. 400 – 406.
6. Banerjee A., Ogale A., Das C., Mitra K, Subramanian C. Temperature distribution in different materials due to short

- pulse laser irradiation. Heat Transfer Engineering. 2005, v. 26, no. 8, p. 41 – 49.
7. Joseph D.D., Preziosi L. Heat waves. Rev. Mod. Phys., 1989, v. 61, №1, p. 41 – 73.
  8. Joseph D.D., Preziosi L. Addendum to the heat waves. Rev. Mod. Phys., 1990, v. 62, no. 2, p. 375 – 391.
  9. Соболев С.В. Процессы переноса и бегущие волны в локально неравновесных системах. УФН, 1991, т. 161, № 3, с.5 – 29.
  10. Соболев С.В. Локально-неравновесные модели процессов переноса. УФН, 1997, т. 167, № 10, с. 1095 – 1106.
  11. Якункин М.М. Исследование процессов релаксации в механизме высокотемпературной теплоемкости вольфрама. ФТТ, 2004, т. 46, № 2, с. 218 – 223.
  12. Балееску Р. Равновесная и неравновесная статистическая механика. М.: Мир, 1978, т. 2, 399 с.
  13. Maxwell J. On the dynamical theory of gases. Phil. Trans. Roy. Soc. 1867, v. 157, p. 49 – 88.
  14. Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М.. Фейнмановские лекции по физике. М.: Мир, 1966, т. 8, 271 с.
  15. Machlup S., Onsager L. Fluctuations and irreversible processes. II. Systems with kinetic energy. Phys.Rev., 1953, v. 91, p. 1512 – 1515.
  16. Гуров К.П. Феноменологическая термодинамика необратимых процессов. М.: Наука, 1978, 128 с.
  17. Haggi P. Escape from a Metastable State. J. Stat. Phys., 1986, v. 42, no. 1/2, p. 105 – 148.
  18. Глестон С., Лейдлер К., Эйринг Г. Теория абсолютных скоростей реакций. М.: ИЛ, 1948, 538 с.

*Якункин Михаил Михайлович — Московский институт электроники и математики (Технический университет), доктор физико-математических наук, профессор. Специалист в области физики высоких плотностей энергии. E-mail: yakunkin@mail.ru.*