УДК 538.9(075)

Н.Н. Горобей, А.С. Лукьяненко

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

О БАЛАНСЕ ЭНЕРГИИ В ТЕРМОУПРУГОМ ЭФФЕКТЕ

Энергетический баланс в термоупругом эффекте анализируется в рамках модели механически деформируемого ансамбля ангармонических осцилляторов. Тем самым разделяются макроскопический аспект действия нагрузки – механическая деформация образца в целом с соответствующим вкладом в баланс энергии (механическая работа) и изменение колебательной энергии осцилляторов на микроскопическом уровне при данной деформации образца. В термоупругом эффекте между этими двумя составляющими происходит перераспределение внутренней энергии образца. Рассматривается также предельный случай низких температур, когда колебательная энергия сводится к энергии нулевых колебаний.

ЭНЕРГИЯ, ТЕРМОУПРУГИЙ ЭФФЕКТ, БАЛАНС ЭНЕРГИИ, ДЕФОРМАЦИЯ, АНГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР.

Введение

В работах [1–3] обсуждается термоупругий эффект – понижение температуры образца при его адиабатическом механическом растяжении (наоборот, увеличение температуры при сжатии). Энергетика этого процесса, особенно при растяжении, не очевидна. Совершая положительную механическую работу при растяжении образца, мы понижаем колебательную энергию атомов (которая пропорциональна абсолютной температуре). При этом уменьшение внутренней энергии образца, связанное с охлаждением, по величине оказывается почти на порядок больше работы внешней силы. Этот эффект более ярко выражен при высоких температурах, однако будучи универсальным явлением, он проявляется и при низких температурах. В указанной температурной области речь идет скорее о термодинамическом проявлении ангармонического эффекта влияния механической нагрузки на частоту колебаний атомов. Будучи квантованной, энергия этих колебаний, а значит и колебательная часть внутренней энергии образца, меняются под действием нагрузки так же, как и в классическом термоупругом эффекте. Энергетика этого процесса для одного нагружаемого квантового ангармонического осциллятора в широкой области температур обсуждается в работе [4]. Сделан вывод, что, как и в классическом случае [1–3], изменение колебательной энергии под действием нагрузки является следствием ангармонизма межатомных связей.

В упомянутых выше работах этот эффект объясняется ангармонизмом межатомного взаимодействия, который является причиной перераспределения между различными составляющими энергии атомов, а внешняя сила играет роль «спускового крючка» в механизме перераспределения. В качестве простой модельной системы рассматривается ангармонический осциллятор во внешнем силовом поле. Однако это объяснение оставляет некоторую неясность в проблеме энергетического баланса, если оставаться в рамках простой одноосцилляторной модели. Причина в том, что самой этой модели придается двойное значение в трактовке эксперимента с механическим нагружением. С одной стороны, силовое поле рассматривается как внешняя сила, действующая на образец (фактически к образцу подвешена гиря). Это – макроскопический аспект действия нагрузки. Тогда весь образец можно представить как ангармонический осциллятор во внешнем силовом поле. При этом динамическая переменная осциллятора описывает макроскопическое удлинение образца, которое не подвержено микроскопическим флуктуациям, а работа силы при растяжении образца (мы далее ограничиваемся этим случаем) – одна из составляющих баланса энергии. С другой стороны, колебания отдельного атома, например в простой модели Эйнштейна для твердого тела, также рассматриваются как колебания ангармонического осциллятора. И в этом случае действие механической нагрузки на колебания учитывается путем добавления потенциальной энергии силового поля к потенциальной энергии осциллятора. Но теперь координата осциллятора является флуктуирующей динамической переменной, возможные значения которой должны подчиняться статистике Максвелла–Больцмана. При этом потенциальную энергию силового поля следует рассматривать как часть внутренней энергии тела. Элементарные осцилляторы оказываются неизолированными, и как следствие – энергия их колебаний меняется под действием силового поля. Энергия колебаний осциллятора является второй составляющей баланса энергии, а ее изменение в силовом поле объясняет термоупругий эффект. Однако в этом рассмотрении, очевидно, теряется связь между изменением внутренней энергии деформируемого твердого тела и макроскопической работой внешней силы.

Решение проблемы баланса энергии может быть получено, если использовать более реалистичную модель твердого тела. Следует разделить макроскопический аспект действия механической нагрузки и ее проявление в динамике отдельного атома. Необходимо учесть тот факт, что макроскопический образец составлен из большого количества элементарных осцилляторов, и в этом коллективе действуют статистические законы. Механическая нагрузка не действует непосредственно на флуктуирующие динамические переменные элементарных осцилляторов, определяя лишь макроскопическое удлинение образца. В качестве модели твердого тела (образца), учитывающей оба аспекта действия нагрузки, в данной работе рассмотрен ансамбль независимых ангармонических осцилляторов, которые все вместе деформируются внешней силой. В этой модели силовое поле вызывает деформацию образца в целом, причем в результате усреднения по ансамблю этот параметр является макроскопическим (не флуктуирующим). Теперь воздействие внешнего силового поля на каждый осциллятор определяется одним параметром – макроскопической деформацией образца.

Ансамбль деформируемых ангармонических осцилляторов

Рассмотрим ансамбль $N\,(N \to \infty)$ независимых ангармонических осцилляторов, которые скрепляют две жесткие рейки. Положение одной рейки фиксировано, а к другой приложена сила $F(t)$. Сами эти рейки не являются необходимым элементом модели, они лишь дают наглядный образ динамической переменной образца, связанной с его макроскопической деформацией. Удлинение этого «образца» будем описывать параметром $y(t)$, который считаем макроскопическим в том смысле, что он не подвержен микроскопическим флуктуациям. Флуктуирует координата смещения из положения равновесия отдельного осциллятора x_k, который двумя одинаковыми связями (пружинками) соединен с рейками. Потенциальную энергию осциллятора запишем в приближении кубического ангармонизма:

$$U(x, y(t)) = \frac{fx^2}{2} + \frac{f(y(t)-x)^2}{2} - \\ - \frac{gx^3}{3} - \frac{g(y(t)-x)^3}{3}. \tag{1}$$

Заметим, что в силу симметрии системы ангармоническая добавка в данном случае является квадратичной функцией координаты x:

$$-\frac{g}{3}(y^3 - 3y^2x + 3yx^2),$$

что значительно упрощает последующее рассмотрение.

Функция Гамильтона всей системы, включающая потенциальную энергию внешнего силового поля $F(t)$, имеет вид:

$$H(x_k, p_k, y(t)) = \sum_{k=1}^{N} h(x_k, p_k, y(t)) - F(t)y(t), \quad (2)$$

где

$$h(x, p, y(t)) \equiv \frac{p^2}{2m} + U(x, y(t)) \quad (3)$$

– функция Гамильтона одного осциллятора.

Деформация образца $y(t)$ определяется внешней силой следующим образом. Условие адиабатичности нагружения, помимо термодинамического значения этого слова, в нашем случае означает, что внешняя сила изменяется со временем медленно, так что скорость деформации образца много меньше средней скорости осциллятора:

$$\dot{y}(t) << \frac{\langle p \rangle}{m}. \quad (4)$$

Считаем также, что подвижная рейка перемещается без ускорения, поэтому в каждый момент времени внешняя сила уравновешена упругой суммарной силой, действующей со стороны осцилляторов. Флуктуациями этой упругой силы пренебрегаем (результат «самоусреднения» в большом ансамбле). Равенство сил означает, что средняя сила, действующая на подвижную рейку равна нулю:

$$\left\langle \frac{\partial H}{\partial y} \right\rangle = 0.$$

Отсюда получаем соотношение:

$$y = \langle x \rangle + \frac{F}{Nf} + \frac{g}{f}(y^2 - 2y\langle x \rangle + \langle x^2 \rangle), \quad (5)$$

где средние вычисляются по периоду колебаний отдельного осциллятора. Эти величины одинаковы для всех осцилляторов.

Второе соотношение между величинами $y(t)$ и $\langle x \rangle$ получим, усредняя по периоду колебаний уравнение движения отдельного осциллятора:

$$m\ddot{x} + fx + f(x - y) - g(y^2 - 2yx) = 0.$$

В результате получаем:

$$\langle x \rangle = \frac{y}{2} - \frac{g}{2f}(y^2 - 2y\langle x \rangle). \quad (6)$$

Поскольку термоупругий эффект – первого порядка по константе ангармонизма g [3], всюду в дальнейшем ограничиваемся этим приближением. Решение системы уравнений (5), (6) в этом приближении имеет вид:

$$y = 2\langle x \rangle \cong 2\left(\frac{F}{Nf} + \frac{g}{f}\langle x^2 \rangle_0\right), \quad (7)$$

где индекс 0 у среднеквадратичного смещения осциллятора означает, что эта величина определяется в гармоническом приближении, в котором имеет место соотношение

$$2f\langle x^2 \rangle_0 = E_{0\text{кол}}, \quad (8)$$

где $E_{0\text{кол}}$ – начальное значение энергии колебаний осциллятора.

Для колебательной энергии осциллятора в гармоническом приближении классический закон равнораспределения энергии дает известное соотношение:

$$E_{\text{кол}} = kT. \quad (9)$$

Фактически на данном этапе произошло разделение упомянутых выше двух аспектов действия силы. С одной стороны, деформация образца $y(t)$ определяет работу внешней силы:

$$A = \int F dy = \int_0^t dt F(t)\dot{y}(t) \cong \frac{F^2(t)}{Nf}, \quad (10)$$

где в последнем равенстве мы учли соотношение (7). Эта работа, как видно, дает известный вклад в упругую энергию деформированного образца. С другой стороны, $y(t)$ является внешним параметром в динамике отдельного осциллятора, к рассмотрению которой обратимся в следующем разделе.

Энергия колебаний и баланс энергии в термоупругом эффекте

Объяснение термоупругого эффекта в новой модели практически сводится к определению зависимости энергии колебаний отдельного осциллятора от классического параметра $y(t)$. Энергией колебаний мы назовем ту часть полной энергии осциллятора, которая остается после вычитания ее минимального значения при данной деформации $y(t)$. Минимум потенциальной энергии достигается в точке x_0, определяемой уравнением:

$$\frac{\partial U}{\partial x} = 2fx_0 - fy + g(y^2 - 2yx_0) = 0,$$

откуда получаем $x_0 = y/2$. Минимальное значение потенциальной энергии равно:

$$U_0 = \frac{fy^2}{4} - \frac{gy^3}{12}. \qquad (11)$$

Это будет второй составляющей в рассматриваемом здесь балансе энергии.

Третья составляющая – энергия колебаний осциллятора:

$$E_{\text{кол}} = K + U_{\text{кол}}, \qquad (12)$$

где

$$K = \frac{p_z^2}{2m} - \frac{p_z \dot{y}}{2} \cong \frac{p_z^2}{2m} \qquad (13)$$

– кинетическая энергия (в последнем равенстве учтено неравенство (4));

$$U_{\text{кол}} = \frac{m\tilde{\omega}^2(t)z^2}{2} - \frac{gz^3}{3} \qquad (14)$$

– потенциальная энергия колебаний, в которой

$$\tilde{\omega}(t) = \sqrt{\frac{2}{m}(f - gy(t))} \cong \omega_0\left(1 - \frac{gy(t)}{2f}\right) \qquad (15)$$

– «смягченная» частота деформированного ангармонического осциллятора, а ω_0 – его собственная частота в отсутствие ангармонизма. Колебательная степень свободы теперь описывается координатой $z \equiv x - x_0$.

Термоупругий эффект объясняется в новой модели зависимостью энергии колебаний (12) от деформации образца, которая целиком определяется временной зависимостью «смягченной» частоты (15). При медленном деформировании образца в динамике осциллятора имеется адиабатический инвариант, который в книге [5] найден для случая гармонического осциллятора:

$$\frac{E_{\text{кол}}(t)}{\omega(t)} = \text{const}. \qquad (16)$$

Однако нетрудно видеть, что с точностью до первого порядка по константе ангармонизма g включительно этот инвариант сохраняется и для ангармонического осциллятора со смягченной частотой (15). Действительно, с точностью до первого порядка по g из (12) получаем:

$$p_z \cong p_{oz} - \frac{gz^3}{6p_{0z}}, \qquad (17)$$

где

$$p_{0z} \equiv \sqrt{2m\left(E_{\text{кол}} - \frac{m\tilde{\omega}^2 z^2}{2}\right)}.$$

Адиабатическим инвариантом является площадь, ограниченная замкнутой кривой $p_z(z)$ в фазовом пространстве осциллятора, а ангармоническая поправка в выражении (17) является нечетной функцией от z. Отсюда следует, что с растяжением образца его температура падает в нашей модели пропорционально внешней нагрузке следующим образом:

$$k_B \Delta T = \Delta E_{\text{кол}} \cong -\frac{gF}{f^2} E_{\text{кол}}. \qquad (18)$$

Термоупругий эффект объясняется соотношением (18). Однако теперь возникает естественный вопрос, куда «девается» энергия колебаний $\Delta E_{\text{кол}}$ при заданной работе внешней силы (10). Ответ на него следующий: эта энергия добавляется к упругой энергии растяжения химических связей. Действительно, изменение потенциальной энергии U_0, определяемой формулой (11), в первом порядке по константе ангармонизма следует выражению:

$$\Delta U_0 \cong \frac{F^2}{Nf} + \frac{gF}{f^2} E_{\text{кол}} - \frac{2gF^3}{3N^2 f^3}. \qquad (19)$$

Последнее слагаемое в соотношении (19) мало, и мы им пренебрегаем, если внешняя сила мала по сравнению с максимальной силой для ангармонического осциллятора:

$$F << F_{\max} = \frac{f^2}{2g}.$$

Таким образом, баланс энергии восстанавливается соотношением (19). При этом отношение первого и второго слагаемых в (19) имеет порядок

$$\sim \frac{x_0 F_{\max}}{E_{\text{кол}}},$$

что очевидно мало при высоких температурах и относительно малых деформациях образца. Это объясняет существенное различие между работой внешней силы и изменением колебательной части внутренней энергии образца, которое наблюдается в эксперименте.

Таким образом, энергетика процесса адиабатического механического нагружения твердого тела и его результат – термоупругий эффект становятся понятными, если четко разделить макроскопический аспект действия нагрузки и его проявление на микроскопическом уровне. Это подразумевает также разделение всех степеней свободы образца на две группы: микроскопические, динамика которых подчиняется статистическим законам, и макроскопические, которые описывают деформацию образца в целом и не подвержены флуктуациям. Аналогичный анализ можно провести и в области низких температур, где существенны квантовые закономерности.

Ансамбль деформируемых квантовых ангармонических осцилляторов

Рассмотрим ансамбль $N (N \to \infty)$ независимых квантовых ангармонических осцилляторов. Рассуждения аналогичны тем, которые были проведены в разделе «Ансамбль деформируемых ангармонических осцилляторов». Только в этом случае проводится уже квантовомеханическое усреднение и тогда в неравенстве (4) $\langle p \rangle = \langle \psi_0 | \hat{p} | \psi_0 \rangle$. Для определенности ограничиваем рассмотрение пределом нулевой температуры, когда все осцилляторы находятся в основном состоянии $|\psi_0\rangle$. В формуле (5) все величины вычисляются в основном состоянии.

Собственная функция основного состояния (в каждый момент времени) имеет вид

$$\psi_0(z, y) = A \exp\left[-\frac{m\tilde{\omega}^2 z^2}{2\hbar} \right],$$

где A – нормировочная постоянная, а «смягченная» частота $\tilde{\omega}$ деформированного ангармонического осциллятора определяется выражением (15). В этом состоянии имеем:

$$\langle x \rangle = \frac{y}{2}, \; \langle x^2 \rangle = \frac{\hbar}{4m\tilde{\omega}}.$$

Вместе с уравнением (5) это дает:

$$y = 2\frac{F}{Nf} + 2\frac{g}{f}\langle x^2 \rangle \cong 2\frac{F}{Nf} + \frac{g}{f^2}\frac{\hbar\omega_0}{2}, \tag{19}$$

где ω_0 – частота осциллятора без ангармонизма, как и раньше.

Механическая работа (10), которая затрачивается на деформирование образца в условиях адиабатического нагружения, идет целиком на приращение его внутренней энергии. Но вызываемые этим воздействием ангармонические эффекты могут быть больше по величине и иметь другой источник, подобно тому, как это наблюдается в термоупругом эффекте. Представляет интерес проанализировать, как это происходит с энергией основного состояния при нулевой температуре. Условие адиабатичности нагружения в данном случае означает, что осциллятор остается в основном состоянии, но меняется его собственная частота, а вместе с ней энергия основного состояния. Тем самым мы имеем квантовый вариант классической теоремы об адиабатическом инварианте [5]. Изменение частоты атомных колебаний при механическом нагружении образца – измеримый эффект ангармонизма. С этим эффектом связана вторая составляющая рассматриваемого здесь баланса энергии:

$$\Delta E_{\text{кол}} = N\frac{\hbar}{2}\Delta\tilde{\omega} \cong -\frac{\hbar\omega_0}{2}\frac{gF}{f^2}. \tag{20}$$

Это изменение колебательной части внутренней энергии образца измеряется на опыте по изменению частоты колебаний осциллятора. Оно не совпадает ни по знаку, ни по величине с работой внешней силы (10).

Третья составляющая баланса энергии – изменение потенциальной энергии (11), связанной с макроскопической деформацией образца в целом. С точностью до первого порядка по константе ангармонизма включительно, и с учетом соотношения (19), получаем:

$$\Delta U_0 \cong \frac{F^2(t)}{Nf} + \frac{\hbar\omega_0}{2}\frac{gF}{f^2}. \tag{21}$$

Таким образом, изменение внутренней энергии образца $\Delta E_{\text{кол}} + \Delta U_0$ равно работе внешней силы (10), и баланс энергии восстановлен. В связи с этим следует обратить внимание на то обстоятельство, что энергия основного состояния $\hbar\omega_0/2$ и ее изменение (20) при механическом нагружении являются необходимыми составляющими рассматриваемого здесь баланса энергии.

Следовательно, адиабатическое механическое нагружение твердого тела при низких температурах вызывает перераспределение энергии между двумя составляющими: энергией нулевых колебаний («смягчение» частоты) и энергией упругой деформации всего образца. В отличие от предшествующих работ, в рассматриваемой здесь модели в обмене энергии участвуют два масштабных уровня: макро- и микроскопический. В этом случае следует говорить о разделении всех степеней свободы образца на квантовые, энергия которых квантуется, и на классические, динамика которых описывается законами классической механики.

Заключение

Следует отметить, что, в отличие от предшествующих работ, перераспределение энергии при адиабатическом механическом нагружении в нашей модели осуществляется между двумя масштабными уровнями: микроскопическим уровнем атомных колебаний и макроскопическим уровнем, где измеряется упругая деформация образца в целом.

Авторы благодарят докторов физико-математических наук А.И. Слуцкера и В.Л. Гилярова за плодотворные обсуждения материалов статьи.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Гиляров В.Л., Слуцкер А.И., Володин В.П., Лайус Л.А.** Энергетика адиабатически нагружаемого возбужденного ангармонического осциллятора // Физика твердого тела. 1997. Т. 39. Вып. 1. С. 153–157.

2. **Слуцкер А.И., Гиляров В.Л., Лукьяненко А.С.** Особенности энергетики адиабатически нагружаемого ангармонического осциллятора // Физика твердого тела. 2006. Т. 48. Вып. 10. С. 1832–1837.

3. **Слуцкер А.И., Поликарпов Ю.И., Каров Д.Д., Гофман И.В.** Энергетика упругого нагружения ангармонического твердого тела // Физика твердого тела. 2013. Т. 55. Вып. 3. С. 610–616.

4. **Гиляров В.Л., Слуцкер А.И.** Энергетика нагруженного квантового ангармонического осциллятора // Физика твердого тела. 2010. Т. 52. Вып. 3. С. 540–544.

5. **Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.** Механика. М.: Наука, 1976. 206 с.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ГОРОБЕЙ Наталья Николаевна – *доктор физико-математических наук, доцент кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

n.gorobey@mail.ru

ЛУКЬЯНЕНКО Александр Сергеевич – *доктор физико-математических наук, профессор кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

alex.lukyan@rambler.ru

Gorobey N.N., Lukyanenko A.S. ON THE ENERGY BALANCE IN THE THERMOELASTIC EFFECT.

The energy balance in the thermo-elastic effect is analysed in the framework of the mechanically deformed ensemble of anharmonic oscillators. As the result, two aspects of mechanical loading – the macroscopic deformation of a sample, with corresponding addition to the energy balance (the mechanical work), and the vibration energy of oscillators change at the microscopic level, are separated. Between these two parts of the internal energy of the sample the exchange in the thermo-elastic effect takes place. The low

temperature limit in which the vibration energy reduces to the energy of zero vibrations is also considered.

ENERGY, THERMO-ELASTIC EFFECT, ENERGY BALANCE, DEFORMATION, ANHARMONIC OSCILLATOR.

REFERENCES

1. **Gilyarov V.L., Slutsker A.I., Volodin V.P., Laius L.A.** Energetics of an adiabatically-loaded excited anharmonic oscillator. *Physics of Solid State*, 1997, Vol. 39, No. 1, pp. 132-135.

2. **Slutsker A.I., Gilyarov V.L., Luk'yanenko A.S.** Energy features of an adiabatically loaded anharmonic oscillator. *Physics of Solid State*, 2006, Vol. 48, No. 10, pp. 1947-1953.

3. **Slutsker A.I., Polikarpov Yu.I., Karov D.D., Gofman I.V.** Energy of the elastic loading of anharmonic solids. *Physics of Solid State*, 2013, Vol. 55, No. 3, pp. 668-674.

4. **Gilyarov V.L. Slutsker A.I.** Energy features of loaded quantum anharmonic oscillator. *Physics of Solid State*, 2010, Vol. 52, No. 3, pp. 585-590.

5. **Landau L.D., Liefshits E.M.** Theoretical Physics. Vol. 1. Mechanics. Moscow, Nauka, 1976. 206 p.

THE AUTHORS

GOROBEY Natalya N.
St. Petersburg State Polytechnical University,
29 Politeknicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
n.gorobey@mail.ru

LUK'YANENKO Alexander S.
St. Petersburg State Polytechnical University,
29 Politeknicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
alex.lukyan@rambler.ru