

К ВОПРОСУ ОБОБЩЕНИЯ КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ ДЛЯ СЛУЧАЯ ПРОСТРАНСТВА НЕЦЕЛОЙ РАЗМЕРНОСТИ

© 2011 С. О. Гладков, С. Б. Богданова

Московский авиационный институт (государственный технический университет),
Волоколамское ш. 4, 125993 Москва, ГСП-3, А-80, Россия

Поступила в редакцию 29.04.2011 г.

Аннотация. Благодаря введению операции дробного дифференцирования дано обобщение квазиклассического кинетического уравнения для электронной функции распределения с целью описания ряда физических свойств фрактальных металлических структур. Как пример его приложения вычислен коэффициент теплопроводности металлического образца, обладающего фрактальной размерностью.

Ключевые слова: фрактал, дробное дифференцирование, кинетическое уравнение, теплопроводность.

ВВЕДЕНИЕ

В последнее время широкое распространение получили исследования, связанные с изучением свойств фрактальных объектов. Стремительный прорыв в этой области начался, по — видимому, с обзора [1], где впервые были сформулированы основные принципы и идеи этого нового научного направления. Подавляющее количество результатов, описанных в этом обзоре, было получено благодаря методам численного моделирования или опытным путем [2—3].

Именно поэтому, целью настоящей работы является разработка чисто теоретического подхода, с помощью которого можно будет описывать не только равновесные, но и различные диссипативные характеристики физических фрактальных структур [4].

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Обычное квазиклассическое кинетическое уравнение [5, 6] позволяет вычислять массу разнообразных диссипативных характеристик весьма широкого спектра кристаллических структур (например, магнетиков, диэлектриков, металлов, и т. п.). При этом, как правило, ограничиваются простыми геометрическими формами образцов типа сферы, куба или тонкой пластины. Как уже было отмечено, подобными формами все природное многообразие материальных объектов не ограничивается, и при более внимательном знакомстве с возможностями природной трансформации выясняется, что все —

таки наиболее распространенными объектами служат фрактальные и самоподобные структуры типа кривой Коха, ковра и куба Серпинского (см. [1, 7—8]).

Суть нашего подхода в сильной степени связана с возможностью применения к подобного рода структурам операции дробного дифференцирования, которую, как было показано в работах [9, 10], весьма удобно ввести с помощью интеграла Фурье для определенного класса абсолютно интегрируемых функций.

Попытки применить известные уравнения математической физики к фрактальным объектам предпринимались, например, в работах [2, 11, 12]. Однако надо заметить, что во всех этих работах применялась операция дробного дифференцирования, которую впервые ввел, по-видимому, А. В. Летников [13].

Мы будем придерживаться несколько иной концепции [9, 10], которая, на наш взгляд, является более удобной и перспективной при решении чисто физических задач.

При этом линейный оператор обычного дифференцирования $\frac{\partial}{\partial x}$ заменяется на оператор (тоже линейный) \hat{A} , действие которого на некоторую функцию $\phi(x)$ вводится как:

$$\hat{A} \phi(x) = i \int_{-\infty}^{\infty} k^{1+\varepsilon} \phi_k e^{-ikx} \frac{dk}{2\pi}, \quad (1)$$

где число $|\varepsilon| < 1$, а ϕ_k — Фурье-образ оригинала функции $\phi(x)$.

С помощью этого оператора \hat{A} квазиклассическое кинетическое уравнение можно тогда записать в следующем виде:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + u_{ie} \hat{A}_i f = L\{f\}, \quad (2)$$

где $L\{f\}$ — интеграл столкновений, индекс $i=1, 2, \dots, 6$, а по повторяющимся индексам подразумевается суммирование. Значения $i=1, 2, 3$ соответствуют декартовым координатам x, y, z , а $i=4, 5, 6$ — импульсному пространству и координатам соответственно p_x, p_y, p_z . u_{ie} представляет собой обобщенную скорость в фазовом пространстве с числом состояний $\Delta\Gamma = \frac{d^3 p d^3 x}{(2\pi\hbar)^3}$, где обычная скорость есть $\vec{u} = (u_x, u_y, u_z)$, а $\vec{p} = (u_4, u_5, u_6)$. Индекс ε указывает на зависимость обобщенной скорости от фрактальной размерности.

При интегрировании обеих частей уравнения (2) по фазовому объему, получаем $\frac{\partial}{\partial t} \int f d\Gamma + \int i\vec{k}' (\vec{u}\vec{k}') e^{-i\vec{k}'x} f_{\vec{k}'} d\Gamma \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3} = \int L\{f\} d\Gamma$. В силу H -теоремы интеграл в правой части тождественно обращается в нуль (независимо бозоны это или фермионы). Поскольку скорость $\vec{u} = \frac{\vec{p}}{m}$ (если речь идет об электронах, где m — масса электрона), то второе слагаемое также исчезает в силу того, что $\int (\vec{p}\vec{k}') d^3 k' d^3 p = 0$ и у нас автоматически получается, как и должно быть [5, 6], уравнение вида $\frac{\partial N}{\partial t} = 0$, которое представляет собой закон сохранения числа частиц консервативной системы $N = \int f d\Gamma = const$ сохраняется.

С помощью уравнения (2) можно вычислить ряд кинетических коэффициентов в случае фрактальных материальных структур. Покажем, к примеру, как можно найти коэффициент теплопроводности металлического образца, который представим себе в виде проволоки, согнутой по законам построения фрактального объекта.

Согласно определению теплового потока имеем:

$$\vec{q} = -\kappa \vec{\nabla} T = -i\kappa \int k^\varepsilon \vec{k} e^{-i\vec{k}x} T_k \frac{d^3 k}{(2\pi)^3}. \quad (3)$$

С другой стороны, тепловой поток можно выразить через функцию распределения f :

$$\vec{q} = \int (\varepsilon(p) - \mu_0) \vec{u}_\varepsilon f_p \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3}, \quad (4)$$

где μ_0 — химический потенциал электронов и традиционно [5, 6] дисперсия электронов обозначается как $\varepsilon(p)$.

Однако в отличие от обычного трехмерного изотропного импульсного пространства, когда закон дисперсии можно выбрать в простейшем виде $\varepsilon(p) = \frac{p^2}{2m}$ [5], в случае пространств нецелой размерности дисперсия электронов становится сильно анизотропной функцией, зависящей от декартовых координат импульса p_x, p_y, p_z .

Как было доказано в работе [14], для случая квазитрехмерного импульсного пространства закон дисперсии электронов можно представить, в виде следующей зависимости: $\varepsilon_p = \frac{1}{2m} (p_x^{2-2\varepsilon} + p_y^{2-2\varepsilon} + p_z^{2-2\varepsilon})$.

Здесь уместно подчеркнуть, что во избежание недоразумений и путаницы по поводу схожести обозначений, везде далее параметр фрактальности будет обозначаться, как это принято в теории фракталов, через ε , а дисперсия электронов, как это принято в теории металлов [5], через $\varepsilon(p)$ или ε_p .

Положим, что $f_p = \bar{f} + \delta f$, где

$$\bar{f} = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon(p) - \mu_0}{T(\bar{r})}} + 1} \quad (5)$$

представляет собой квазиравновесную неоднородную функцию распределения электронов, а $\delta f = \frac{\partial \bar{f}}{\partial T_0} \delta T$ малая поправка к функции распределения.

Тогда формула (4) примет вид:

$$\vec{q} = \int (\varepsilon(p) - \mu_0) \vec{u}_\varepsilon \delta f \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \quad (6)$$

Для вычисления δf воспользуемся τ -приближением.

В стационарном случае получаем:

$$\vec{v} \nabla \bar{f} = -\frac{\delta f}{\tau_p},$$

где $L(f) \approx -\frac{\delta f}{\tau_p}$.

Отсюда:

$$\delta f = -\tau_p \vec{v} \nabla \bar{f} = -\tau_p \vec{v} \frac{\partial \bar{f}}{\partial T_0} \nabla T.$$

С учетом полученного выражения для δf формула (6) примет вид:

$$\begin{aligned} \bar{q} &= -\int (\varepsilon_p - \mu_0) \bar{u}_\varepsilon (\tau_p \bar{u}_\varepsilon \frac{\partial \bar{f}}{\partial T_0} \bar{A} T) \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} = \\ &= -i \int (\varepsilon_p - \mu_0) \tau_p \bar{u}_\varepsilon \bar{k}^\varepsilon (\bar{u}_\varepsilon \bar{k}) \frac{\partial \bar{f}}{\partial T_0} T_k \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \end{aligned} \quad (7)$$

Из условия равенства выражений (3) и (7), находим искомым тензор теплопроводности фрактального объекта:

$$\kappa_{ik} = \int (\varepsilon_p - \mu_0) \tau_p u_{\varepsilon_i} u_{\varepsilon_k} \frac{\partial \bar{f}}{\partial T_0} \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (8)$$

Для вычисления интеграла (8) сделаем несколько упрощающих предположений.

Во-первых, предположим, что изучается кристаллическая структура, обладающая кубической симметрией, в силу чего наш фрактальный объект в целом можно будет считать изотропным.

При этом предположении тензор теплопроводности κ_{ik} можно представить как $\kappa_{ik} = \kappa \cdot \delta_{ik}$, где δ_{ik} — символ Кронекера. Тогда в правой части равенства (8) произведение компонент вектора скорости $u_{\varepsilon_i} u_{\varepsilon_k}$ следует заменить на $\frac{u_\varepsilon^2}{3} \cdot \delta_{ik}$, где множитель $1/3$ появляется в результате усреднения по направлениям \bar{u} .

Поскольку скорость определяется как $\bar{u}_\varepsilon = \frac{\partial \varepsilon}{\partial \vec{p}} = \frac{1-\varepsilon}{m} (p_x^{1-2\varepsilon} \vec{i} + p_y^{1-2\varepsilon} \vec{j} + p_z^{1-2\varepsilon} \vec{k})$, то $\frac{u_\varepsilon^2}{3} = \frac{(1-\varepsilon)^2}{3m^2} (p_x^{2(1-2\varepsilon)} + p_y^{2(1-2\varepsilon)} + p_z^{2(1-2\varepsilon)})$.

Во-вторых, в силу того, что спектр электронов фрактального металла является анизотропным, время релаксации электронов τ_p является функцией ε . Поэтому при выполнении интегрирования (благодаря применению теоремы о среднем) время релаксации можно вынести за знак интеграла и приписать ему индекс ε , то есть вместо τ_p писать теперь $\bar{\tau}_\varepsilon$.

И, наконец, последнее упрощающее предположение. Будем предполагать, что электронный газ является вырожденным и для него выполняется условие $T \ll \varepsilon_F$.

В соответствии с этим производная от равновесной функции распределения по энергии согласно [5, 6] может быть представлена в виде $\frac{\partial f_0}{\partial T} \approx \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon(\vec{p})} \approx -\delta(\varepsilon(\vec{p}) - \varepsilon_F^{1-2\varepsilon})$, где $\delta(x)$ — дельта-функция Дирака.

А потому $\frac{\partial f_0}{\partial T} = -\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon(\vec{p})} \frac{\varepsilon(\vec{p})}{T^{1-2\varepsilon}} \approx \frac{\varepsilon(\vec{p})}{T^{1-2\varepsilon}} \delta(\varepsilon(\vec{p}) - \varepsilon_F^{1-2\varepsilon})$.

В результате выражение для коэффициента теплопроводности примет вид:

$$\begin{aligned} \kappa &= \frac{\bar{\tau}_\varepsilon}{6m^3 T^{1-2\varepsilon}} \int (p_x^{2(1-2\varepsilon)} + p_y^{2(1-2\varepsilon)} + p_z^{2(1-2\varepsilon)}) \times \\ &\times (\varepsilon(\vec{p}) - \mu_0^{1-2\varepsilon}) \delta(\varepsilon(\vec{p}) - \varepsilon_F^{1-2\varepsilon}) \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3}. \end{aligned} \quad (9)$$

Однако, даже, несмотря на все прозвучавшие выше упрощения, полученный интеграл вычисляется совсем не просто.

Удобнее всего провести его вычисление в сферической системе координат: $p_x = p \sin\theta \cos\phi$, $p_y = p \sin\theta \sin\phi$, $p_z = p \cos\theta$, $0 \leq \phi \leq 2\pi$, $0 \leq \theta \leq \pi$.

После некоторых довольно сложных и громоздких преобразований, с использованием свойств дельта-функции, получаем в результате:

$$\kappa = \frac{\bar{\tau}_\varepsilon (1-2\varepsilon)}{24\pi m^{2(1-2\varepsilon)}} \cdot \frac{p_F^{3-10\varepsilon} T^{1-2\varepsilon}}{\hbar^{3(1-2\varepsilon)}} v_\varepsilon g(\varepsilon), \quad (10)$$

где функция

$$\begin{aligned} g(\varepsilon) &= \int_0^{2\pi} \int_0^\pi [\sin^{2(1-2\varepsilon)} \theta \cos^{2(1-2\varepsilon)} \phi + \\ &+ \sin^{2(1-2\varepsilon)} \theta \sin^{2(1-2\varepsilon)} \phi + \cos^{2(1-2\varepsilon)} \theta] \sin\theta d\theta d\phi \end{aligned} \quad (11)$$

а фигурирующая в решении (10) мера v_ε обеспечивает правильную размерность коэффициента теплопроводности фрактального металла.

Как видим, коэффициент теплопроводности оказывается сложной функцией параметра фрактальности ε , что и дает аналитическую связь между чисто физическими свойствами фракталов и геометрическими [9, 10, 14].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Предложено обобщение кинетического уравнения на случай образца не целой размерности.

2. В качестве примера его приложения дано вычисление коэффициента теплопроводности фрактальной металлической проволоки.

3. Практическое приложение предложенного выше подхода может быть осуществлено в прикладных задачах, например, в теории фрактальных антенн, где исследование тепловых и радиолокационных свойств проводится в основном экспериментально [15—17].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Мандельброт Б.* Фрактальная геометрия природы. Ижевск: РХД, 2002. 665 с.
2. *Фракталы в прикладной физике / Под общей ред. А. Е. Дубинова.* ВНИИЭФ. Арзамас-16. 1995. 216 с.
3. *Фракталы в физике // Труды 6 межд. симпозиума*

по фракталам в физике (МЦТФ, Триест, Италия, 9—12 июля. 1985.) / Под ред. Л. Пьетронезе и Э. Тозатти. Пер. с англ. под ред. Я. Г. Синая и И. М. Халатникова. М.: Мир, 1988. 672 с.

4. *Гладков С. О.* О некоторых специфических свойствах нового типа дискретных материалов // Доклады РАН. 2006. Т. 408. В. 2. С. 182—187.

5. *Лифшиц И. М., Азбель М. Я., Каганов М. И.* Электронная теория металлов. М.: Наука, 1971. 450 с.

6. *Гладков С. О.* Физика композитов: термодинамические и диссипативные свойства. М.: Наука, 1999. 330 с.

7. *Федер Е.* Фракталы. М.: Мир, 1991. 254 с.

8. *Зельдович Я. Б., Соколов Д. Д.* Фракталы, подобие, промежуточная асимптотика // УФН. 1985. Т. 146. Вып. 3. С. 493—506.

9. *Гладков С. О.* К теории одномерной и квазиодномерной теплопроводности. // ЖТФ. 1997. Т. 67. В. 7. С. 8—12.

10. *Gladkov S. O., Bogdanova S. B.* // Physica B: J. of Condensed matter. 2010. V. 405. P. 1975—1977.

11. *Wyss W.* The fractional diffusion equation // J. Math. Phys. 1986. V. 27 № 11. P. 2782—2785.

12. *Бабенко Ю. И.* Применение дробного дифференцирования в задачах теории теплопроводности. Л.: Государственный институт прикладной химии, 1975. 91 с.

13. *Летников А. В.* Теория дифференцирования с произвольным указателем. М.: 1868. 96 с.

14. *Гладков С. О., Богданова С. Б.* // Вестник Московского государственного областного университета. Физика-математика. № 2. 2010. С. 76—80.

15. *Кравченко В. Ф., Масюк В. М.* Современные методы аппроксимации в теории антенн. Кн.3. М.: ИПРЖР. 2002. 72 с.

16. *Werner D. H. and Werner P. L.* // Radio Science. 1996. V. 31. № 6. P. 3331—3343.

17. *Слюсар В.* // Электроника: Наука, Технология, Бизнес. 2007. № 5. С. 8—83.

Гладков Сергей Октябрьнович — профессор, кафедры математического моделирования, Московский авиационный институт; тел.: (495) 434-7505, e-mail: sglad@newmail.ru

Gladkov Sergey O. — professor, department of mathematical modeling, Moscow Aviation Institute; tel.: (495) 434-7505, e-mail: sglad@newmail.ru

Богданова Софья Борисовна — ст. преп. кафедры математического моделирования, Московский авиационный институт; тел.: (903) 290-9503, e-mail: sonjaf@list.ru

Bogdanova Sofia B. — the senior teacher, department of mathematical modeling, Moscow Aviation Institute; tel.: (903) 290-9503, e-mail: sonjaf@list.ru