УДК 548.3

ТЕОРЕМА ОБ ИНВАРИАНТНОСТИ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА ОТНОСИТЕЛЬНО ПОВОРОТНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ СИММЕТРИИ

Таланов В.М., Федий В.С.
Южно-Российский государственный технический университет, Новочеркасск

Доказан ряд математических утверждений о существовании структурных и критических состояний вещества, генерированных поворотной симметрией термодинамического потенциала.

В наших предыдущих публикациях (см., например, [3]) в рамках формализма матрицы жесткости ψ-компонентной термодинамической системы (это матрица вторых производных термодинамического потенциала по экстенсивным переменным y_i, $i= 1,2, \ldots,\psi+n$), расширенной за счет учета n внутренних структурных параметров, доказан ряд математических утверждений относительно размерности нулевого подпространства (и, следовательно, числа фаз и структурных состояний), генерированных плоскостями отражения. В данном сообщении решается вопрос о размерности нулевого подпространства расширенной матрицы жесткости термодинамического потенциала, инвариантного относительно поворота вокруг оси OZ на угол $2\pi/n$.

Полученные результаты сформулированы в виде теоремы.

Теорема. Пусть термодинамический потенциал $U(y_1, y_2,..., y_{\psi+n}; \lambda)$ и его частные производные по y_i первого и второго порядков непрерывны по y_i и λ. Здесь λ — параметр, возможно многомерный. Пусть также термодинамический потенциал инвариантен относительно поворота вокруг оси OZ, ориентированной вдоль $y_{\psi+n}$, на угол $2\pi/n$. Предположим, что для некоторой последовательности $\lambda_m \rightarrow \lambda_o$ существует такая последовательность точек P_m $(y_{1m}, y_{2m},..., y_{(\psi+n)m};)$, что:

1) $U(y_1, y_2,..., y_{\psi+n}; \lambda)$ имеет стационарную по $\vec{y}$ точку $P_m(y_{1m}, y_{2m},..., y_{(\psi+n)m}; \lambda_m)$, где $(y_{1m}, y_{2m},..., y_{(\psi+n-1)m}) \neq (0, 0, \ldots,0)$.

2) Матрица жесткости $\|U_{ij}\ (P_m)\|$ неотрицательно определена.

3) при $m\rightarrow\infty$ $P_m(y_{1m}, y_{2m},..., y_{(\psi+n)m}; \lambda_m) \rightarrow P_0(0, 0,..., y_{(\psi+n)0}; \lambda_0)$.

Тогда: 1) P_0 — стационарная точка $U(y_1, y_2,..., y_{\psi+n}; \lambda_0)$

2) Матрица жесткости $\|U_{ij}\ (P_0)\|$ неотрицательно определена.

3) Если обозначить Ω_{P0} — нулевое подпространство $U_{ij}\ (P_0)$, т.е. подпространство, натянутое на собственные векторы, отвечающие собственному значению равному 0, то при n=2 $\dim \Omega_{P0} \geq 1$, при n=3,4,6 $\dim \Omega_{P0} \geq 2$.

Доказательство.

1. $\partial U(P_m,\lambda_m)/\partial y_i = 0$. (1)

При $m\rightarrow\infty$ $(P_m, \lambda_m)\rightarrow (P_0, \lambda_0)$. Поэтому переходя в (1) к пределу и пользуясь предположением о непрерывности производных, получаем $\partial U(P_0, \lambda_0)/\partial y_i = 0$.

2. Матрица жесткости $\|U_{ij}\ (P_m, \lambda_m)\|$ неотрицательно определена. Согласно известной теореме [1, гл. X, параграф 4] это означает, что все главные миноры этой матрицы неотрицательны. В силу предположенной непрерывности вторых производных, все главные миноры матрицы жесткости $\|U_{ij}\ (P_0,. \lambda_0)\|$ тоже будут неотрицательны, т.е. матрица $\|U_{ij}\ (P_0, \lambda_0)\|$ — неотрицательно определенная.

3. Пусть P_m' точка, полученная поворотом точки P_m на угол $2\pi/n$ вокруг оси OZ. Проведем ось L через P_m и P_m' (рис.).

Так как P_m и P_m' — стационарные точки, то $\partial U(P_m,\lambda_m)/\partial L = \partial U(P_m',\lambda_m)/\partial L = 0$ и по теореме Ролля, существует на оси точка Q, в которой $\partial^2 U(Q_m)/\partial L^2 = 0$ (Q находится между P_m и P_m'). При $m\rightarrow\infty$ точка $Q_m \rightarrow P_0$. Рассмотрим всевозможные единичные векторы $(\alpha_1, \ldots,\alpha_{\psi+n-1}, 0)$, выходящие из точки P_0 и перпендикулярные оси OZ. Покажем, что среди них найдется такой вектор $(\alpha_1^0, \ldots,\alpha_{\psi+n-1}^0, 0)$, что $d^2U(t\alpha_1^0, \ldots,+t\alpha_{\psi+n-1}^0,..., y_{(\psi+n)0} + t\ 0)/dt^2 \big|_{t=0} = 0$. Из неотрицательной определенности $\|U_{ij}\ (P_0, \lambda_0)\|$ сразу следует, что все такие производные ≥ 0. Если все они положительные, то из непрерывности вторых производных U и компактности окружности $\alpha_1^2 +\ldots, + \alpha_{\psi+n-1}^2 = 1$ в $R^{\psi+n-1}$ сразу следует, что для некоторого $\varepsilon>0$: $d^2U(y_1 +t\alpha_1, \ldots,y_{\psi+n-1} +t\alpha_{\psi+n-1},..., y_{(\psi+n)}, \lambda)/dt^2 \big|_{t=0} > \varepsilon$ для всех $\alpha_1^2 +\ldots, + \alpha_{\psi+n-1}^2 = 1$ и всех $y_1^2 + y_2^2 +,...,+ (y_{\psi+n}{}^2 - y_{(\psi+n)0}{}^2) < \delta$, $|\lambda - \lambda_0| < \delta$ при некотором достаточно малом $\delta>0$. Но при достаточно большом m: $y_{1m}^2 + y_{2m}^2 +,...,+ (y_{(\psi+n)m}{}^2 - y_{(\psi+n)0}{}^2) < \delta$, $|\lambda_m - \lambda_0| < \delta$. А это противоречит тому, что $\partial^2 U(Q_m)/\partial L^2 = 0$. Значит, существование нужного вектора $(\alpha_1^0, \ldots, \alpha_{\psi+n-1}^0, 0)$ доказано. По теореме о матрице жесткости [2] этот вектор $(\alpha_1^0, \ldots, \alpha_{\psi+n-1}^0, 0)$ — собственный вектор матрицы жесткости $\|U_{ij}(P_0,. \lambda_0)\|$, отвечающий собственному значению 0. Ясно тогда, что вектор, полученный из этого вектора поворотом на угол $2\pi/n$ — тоже собственный вектор, отвечающий собственному значению 0. Рассмотрим два случая:

- n=2. Указанные два вектора противоположны. Размерность натянутого на них подпространства равна 1, т. е. при: n=2 $\dim\Omega_{P0} \geq 1$.

- n=3,4,6. Подпространство, натянутое на эти два вектора двумерно, т.е. $\dim\Omega_{P0} \geq 2$.

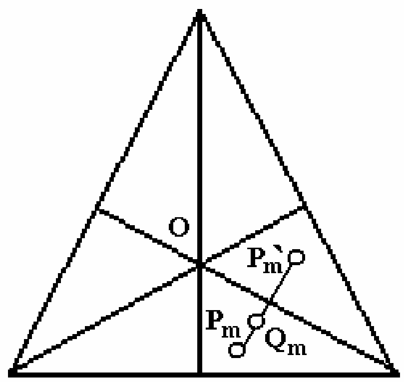

Рисунок 1. Графическое пояснение к доказательству теоремы.
Сечение, перпендикулярное оси вращения. Для определенности показан случай n=3.

В наших рассуждениях мы пользовались очевидным фактом, что множество всех собственных векторов, отвечающих одному и тому же собственному значению (в нашем случае нулю), дополненное вектором 0, образует линейное подпространство. Полученные результаты необходимы для интерпретации структурных превращений в кристаллах в рамках развиваемой авторами обобщенной термодинамики вещества.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гантмахер Ф.Р. Теория матриц. М., Наука. 1988. 549с.

2. Таланов В.М., Федий В.С. //Изв. Вузов. Химия и химическая технология. – 1997. – Т.40. вып.5. С.61.

3. Таланов В.М., Федий В.С. //Изв. Вузов. Химия и химическая технология. – 1998. – Т.41. вып.6. С.91.

THE THEOREM ABOUT INVARIANCY OF THERMODYNAMIC POTENTIAL IN REGARD TO ROTATIONAL ELEMENTS OF SYMMETRY

Talanov V.M., Fedij V.S.
South-Russian state technical university, Novocherkassk

A number of mathematical statements about existence of the substance structural and critical states generated by rotational symmetry of thermodynamic potential has been proved.