

与非平衡问题相关的尺度效应：场与微粒*

薛昌明 (George C Sih)^{1,2,3} 唐雪松^{3,4}(译)

¹ Department of Mechanical Engineering and Mechanics, Lehigh University, Bethlehem, PA 18015, USA

² 中国科学院力学研究所, 北京 100080

³ 华东理工大学机械学院化学研究室, 上海 200237

⁴ 长沙理工大学桥梁与结构工程学院, 长沙 410076

E-mail: gcs@ecust.edu.cn

摘要 纳米技术的出现, 使我们有必要更好地了解, 在原子水平上材料微结构的变化是如何影响和控制着材料的宏观性能. 这一挑战涉及到许多以前不曾考虑和不曾了解的现象. 其中, 位错理论的基础现在知道是有问题的. 宏观尺度下采用的简化假设, 也许不能用于微观和纳米尺度. 尺度效应的含义, 涉及到物理系统的非均质和非平衡特性. 宏观尺度下的均匀与平衡特性, 在材料的物理尺度减少到微米量级时就不再保持了. 这些基本观点不能够为了方便而随意到处使用, 因为这会改变预测的结果. 更令人不满的是在建立物理模型时缺乏一致性. 由此产生的问题是在确定制造过程中的有关参数时无能为力, 导致由于成本过高而不切实际的终端产品. 先进的复合材料和陶瓷材料就存在这样的问题. 本文将要讨论的是在原子尺度与连续介质尺度下应用理论模型时存在的潜在问题, 而不是去揭示自然的真相. 主要讨论微粒, 均匀连续介质或者两者的结合. 尺度效应问题当前的发展趋势, 趋向于在有或者没有时间效应的情况下寻找材料微结构的不同特征尺寸. 从原子模拟模型中将了解到许多情况, 原子模拟计算将揭示计算结果如何随着边界条件和尺度变化而不同. 量子力学, 连续介质力学和宇宙模型证明, 没有普遍适用的方法. 当前的主要兴趣也许是针对多尺度物理问题在技术上建立更高的精度, 以得到一个更好的表达结果.

关键词 尺度效应, 连续场, 微粒, 非平衡热力学, 等能密度理论 (isoenergy density theory), 原子模拟理论

“……连续场与物质点, 作为物理现实的描述, 并肩而来. 直到今天, 这种二元论或许仍困扰着有理性的头脑.”

阿尔伯特·爱因斯坦

1 引言

纳米尺寸的产品是 21 世纪科学与技术面临的一个挑战, 因为这是世界经济发展的一个重要结果. 美国政府投向纳米技术的研究经费与风险投资很快将达到数十亿美元. 2000 年美国政府在纳米技术上花费了 2.72 亿美元, 这个数目在 2001 年将增加大约 5 亿美元. 有将近 7200 万美元用于纳米技术的风险投资基金专款投向各大公司, 如材料科学方面的 Carbon Nanotechnology 公司, 医药方面的 Quantum Dot 公司与 C Sixty 公司, 光学仪器方面的 Siwave 公司

和 Arrayx 公司等. 众所周知, 纳米管的生产, 由三菱公司、Materials and Electrochemical Research 公司、Research Corporation Technologies 公司和其他有同样兴趣的公司积极充当先锋^[1]. 这些纳米管极其微小, 仅相当于一根人的头发直径的 1/80 000. 然而, 这些纳米管的强度却高于任何今天所知的纤维, 是复合材料中的理想增强材料. 也许, 可用来替代汽车轮胎中的碳黑材料, 以增加轮胎的寿命. 纳米材料研究还可在其他领域内取得突破, 如微电子学和纳米医学等.

然而, 成功之路并不总是直线向前的. 当物理和

收稿日期: 2003-06-04, 修回日期: 2004-01-15

* 《力学进展》副主编洪友士推荐.

化学不得不面对制造业时,有许多障碍要去克服。大型复杂系统还必须要靠由一个原子一个原子地构造出来的宏观材料来组成。数万亿个原子的排列,要求清楚地了解尺度效应,以及在微观、细观、宏观尺度下描述材料性能的方法。工程师们不得不深入钻研到物理学当中,希望能借用不久前物理学中出现的新概念与新方法来解决他们现在的问题。这样做,很可能比发展一个新的学科来处理纳米技术更为困难。在宇宙尺度下预测误差的容许范围,显著不同于纳米尺度下的误差容许范围。同样,对原子弹爆炸冲击波能量预估的误差,也显著不同于对计算机芯片容许热量预测的误差。纳米技术的成功应用,离不开对问题的物理和化学机理的充分了解。

材料工程师与科学家们都知道,具有整齐晶格排列的理想固体的强度,要比含有晶粒边界和缺陷的多晶体材料的强度高出3个数量级或更多^[2]。人们花了一个多世纪的时间才了解到在普通环境与恶劣环境下如何有效地利用合金结构钢。现在材料内部结构的特征长度已经减小到($10^{-5} \sim 10^{-9}$)m(纳米),人们将不得不进行一系列新的探索。ASTM 制定的关于试件尺寸的强制性标准是以厘米为单位的,对于微米量级的试件将不再有效。试验标准化的绝对概念也许要被实施精确控制的加工所取代。微米量级的试件中的应力从MPa增加到GPa,增加了3个数量级^[3]。这是否就意味着小尺度下的材料强度要高,更不容易断裂呢?或许,在纳米尺度下基于应力概念的强度解释不再成立了。同样,在纳米材料中大量存在亚原子瑕疵,位错也许不再代表缺陷^[4]。研究表明,当表面积从 1cm^2 减小到 1mm^2 时,热能消耗略有增加。计算机芯片中的热流密度在300K时,据估计为($10^5 \sim 10^6$)W/m,与从地球轨道再入的飞行器上的热流密度范围相当,而那里的温度要高出5倍。如果尺寸继续减小到分子的尺度,纳米计算机上每单位体积释放的热量将相当于黑色火药。集成电路的设计在密度上有一个极限,取决于耗散热量的多少。这些预测结果可能正确也可能不正确,因为关于机械系统的尺度效应还知道的很少。今天所知道的是,现在的设计师大大低估了小型化机器的阻尼。

现在,人们又重新燃起了对大规模原子模拟计算的兴趣^[5~9]。目标之一就是获得有关原子运动的详细信息,及探索由于空间尺度的变化对固体行为的影响。采用嵌入原子方法(embedded atom method),对承受剪切作用的不同尺寸的镍、金、铜块进行了计算,获得了屈服强度的结果^[8,9]。计算中参数的变化情况是:边界温度为300K和500K,施加的应变率为($10^7 \sim 10^{12}$) s^{-1} ,试件尺寸为($10^4 \sim 10^6$)个原子(或($2 \sim 300$) μm)。试件的体积与表面积之比 V/A 取

作长度参数。在($10^{-10} \sim 10^{-4}$)m的尺度范围内,屈服强度数据与 V/A 之间有着良好的对应关系。

如果问题涉及到从纳米尺度到宏观尺度这样一个大的范围,而物质是作为微粒还是作为场来描述都成为一个疑问,那么描述材料行为的尺度参数是否是一个有效的概念就值得仔细审查。提出这样的质疑是有理由的,因为微观实体不具有宏观物体的性质,尽管二者依稀有些相似。对于分层次确定材料的行为,尽管准则是必要的,但无论是数值模拟还是试验,仅仅是监测材料微结构形态的变化还是不够的,这恰恰可能会抹杀由于自然界的复杂性对于尺度效应的任何违反。

其他的原子模拟方法包括:系统在0K下的能量最小化方法^[5];考虑热振动效应的分子动力学方法^[6];考虑原子从一个晶格运动到另一个晶格的晶格 Monte Carlo 方法^[7];前面提到过的考虑许许多多原子势能的嵌入原子方法^[8,9];及其他一些相信即将出现的方法。这些大规模计算方法采用成百上千或更多个原子,时间步长小于原子振动周期,即 10^{-13} s。未被证实的假设、猜测和经验数据充斥在这些计算之中。经常采用的是电子波函数,用于确定作用在单个原子上的力,它假定自然界的微粒性质与连续介质性质可以交替使用。原子在真实环境下应使系统能量最小化,这一点得不到保证。经验性的原子结合势能没有考虑结合力与环境有关,同时广泛采用的 Lennard-Jones 双势能(Lennard-Jones pair potential)遗漏了许多个体的耦合效应。承认自然界的真相也许永远不能被了解,但如果付出更多的努力以一种一致的方式以避免物理模型与自然真实的背离会更加令人满意。以物理上的过分简化来降低数值计算上的复杂性,并不是一个公平交易。

由一个个原子来构造宏观材料,对这一过程及宏观材料的性能实施人为控制,要达到这一目标,就应该发展理论分析模型,综合考虑应变率、温度、试件尺寸,以及未曾提及的材料晶格结构中缺陷的演化等影响因素并加以量化。这些影响因素不应该被认为是一些偶然因素,而是一些基本的影响因素。原子穿过晶体的运动不会发生,除非原子由于某种原因从它在结构中的通常位置上被移走。这样的原子位移,在原子尺度下被认为是缺陷。不难设想,相似的情况也能发生在亚原子的尺度上。这种类型的缺陷对物理学上的一个佯谬给出一种可能的解释,这个佯谬与IBM的科学家们1986年在苏黎世报告的超导现象有关。那个时候一个令人困惑不解的问题就是:“.....在晶体的理想形式中每个单元都是完全一样的,不能传导任何电流”。随后,在美国新泽西州霍姆代尔(Holmdel, NJ)的AT&T Bell实验室里观

测到：“由于失去了氧原子和钇原子，原子面移动了位置……这些缺陷本身也许是超导现象的直接原因。在其他一些规则晶体中的缺陷与地震断层相类似，为电子流与晶体振动之间非同寻常的相互作用提供了一个通道，这种相互作用似乎是超导性所必须的。”另一种可能的解释是基于裂纹状滑移线前端免位错区 (dislocation free zones) 的概念^[10]。文献 [11, 12] 中对这些区域进行了理论分析预测，这些区域对应于局部的冷却，抑制能量的耗散，从而抑制位错的发射。在拉伸状态下，已经观测到纯不锈钢、铜和铝等单晶体材料在裂尖处的免位错区^[13]。一组滑移线能够发生位错发射，并由此改善材料的力学与电学性能吗？

随尺寸的减小，自然界将表现出微粒特性，那里原子的运动是连续的。原子在它们的平衡位置附近来回振动。只有在完全没有热扰动的热力学绝对零度下，原子才处于静止状态。由于缺乏绝对的参考基准，所有的描述不得不互为参考基准。宏观问题相对于宇宙尺度是微小的，而相对于纳米尺度却是巨大的。一个微粒系统能否作为一个平滑的连续场来处理仍是一个猜测。只要概念确实是有用的，那它就将科学发展中继续扮演它的角色，尽管自然界的微粒性与连续性共存的这种二元性还将争论下去。

科学与技术的进步，不是依赖于对真相的了解，而是依赖于事实的可重复性与一致性。然而，应该清楚地认识到基本方法的缺陷，并尽量减小这种缺陷，否则的话进步将是短暂的。下面的讨论将倾向于纳米技术发展方面有待于改进与完善之处。

量子力学的局限性 量子电动力学在试图解决固体微粒与周围空间之间的明显差异方面并没有取得成功。它假设粒子仅仅是场的局部凝聚。量子场论依赖于微粒之间的相互作用。任何关于微粒尺寸的约定，都意味着存在更小的微粒。这一寻找最小微粒的过程很显然是不能令人满意的。因此，量子力学仍没有解决连续介质概念与微粒结构概念之间的矛盾，只不过是这一矛盾引入到一个更低的尺度下或者说量子尺度下。

爱因斯坦是对场和微粒二元论持怀疑态度的。在粒子波模型中他为了证实电绝缘体中声子的存在而作的假设不应该被认为是波-粒二重性。波与连续介质在本文中并不是同义语。“微粒波”这一术语是用于描述基本粒子的量子效应的，并没有去暗示自然界应具有微粒性还是连续介质性。也许两者都不是。普朗克长度 4×10^{-33} cm，时间 10^{-42} s 与能量 10^{18} GeV，意味着还有更小的尺寸、更快的速度与更高的能量还没有从物理问题中识别出来。

空间尺度与时间相关性 自然界有一个与空间尺度相

关的时钟。据观测，一个分子在一个直径 1 cm 的圆内运动的时间不会持续 1 s 以上，然后必然会跑出这个 1 cm 的圆形区域，这一现象就表现出空间与时间尺度的相关性。那种试件尺寸与微结构的特征长度和时间无关的通常概念仅仅是近似的，在原子尺度下将不再成立。原子之间会发生碰撞，并消耗能量。这些现象是纳米尺度下的第一阶效应。

在物理学范畴内，空间尺度、率效应、温度与能量耗散应综合在一起来描述物理过程的行为，其中一个量的改变将影响到其他各量。针对固体、液体与气体问题，采用基于等能密度空间 (isoenergy density space) 的非平衡热力学理论，对这些物理量之间的耦合效应，可以进行定量分析^[14,15]。组成这一等能密度空间的单元的大小并不要求趋于零。这些单元的尺寸与方向在每一时间步长内都是变化的，由真实反映自然界非平衡性的位移场来确定。这种单元尺寸的有限性，可以考虑到面积能量密度与体积能量密度之间的转换这一空间尺度效应的基本性质，这一点在古典连续介质力学中是没有考虑到的。由应变梯度确定的特征长度，显然不同于由体积与表面积之比的变化率确定的特征长度，应将二者区别开来。在这一点上，可以结合 Boltzmann 用统计力学得出的广义热传导表达式^[15]进行更多的讨论。

能量耗散的尺度效应 体积与表面积之比大的物体，由体积膨胀而消耗的能量，远大于变形消耗的能量^[16,17]。体积膨胀占主导时材料就表现出脆性的行为。当体积与表面积之比减小，变形所消耗的能量所占份额赶上体积膨胀时，单位体积的同样材料就更多地表现出延性的性质。这种延性-脆性的转变依赖于材料的微结构、试件的形状与尺寸、温度及应变率，这样一些因素是构件设计的重要依据。无论是否有非线性，体积膨胀消耗的能量与变形消耗的能量二者之间的比例，可由静态能量密度函数确定出来^[18,19]。是体积膨胀占优还是变形占优这一基本概念对于分析纳米材料依然是有效的。

为了阐明一个线裂纹驱动力的来源，在裂纹尖端区域嵌入了一个分子动力学区域^[20,21]，这一区域被一个连续介质力学的场所包围。界面的边界条件采用应力与应变连续性条件。另外，一个分岔滑移线系统被嵌入到其中作为由剪切作用力驱动的位错发射的来源。最近来自电弹性连续介质力学与能量密度理论的新发现^[18,19]已经预测到(不是预先假定的)，在非常靠近裂纹尖端的区域内裂纹扩展实际上是分岔的。众所周知，宏观裂纹的扩展在其两侧伴随着一个被包裹的塑性区，不仅如此，还能预测出这一塑性区距裂纹尖端的距离。这两种损伤模式，可同时用一个连续介质力学理论预测出来，并且如果那些主

要的物理参数留着有待定义的话, 这一理论并不受尺度大小的限制. 这并不奇怪, 因为电弹性材料的结构特性, 随着距裂纹尖端的距离不同而不同, 这就使得体积膨胀能量密度与变形能量密度之比值与距离有关. 这种多尺度特性如图 1 所示, 图 1(a) 是微观尺度下的损伤模式, 图 1(b) 是宏观尺度下的损伤模式. 然而, 图 1(a) 所示的分岔损伤模式, 与文献 [20, 21] 中采用的位错滑移线有着不同的解释. 分岔发生在 $\pm\theta_d$ 的位置上, 那里是体积膨胀占优的. 由于缺乏一个更好的术语, 它们被称之为微膨胀线 (lines of microdilatation). 而一个被包裹的微变形区位于对称轴上. 熟知的宏观损伤情形如图 1(b) 所示. 宏观变形区 (变形占优的区域) 出现在 $\pm\theta_p$ 的位置上, 实际上是被包裹的塑性区. 同时, 理论预测出在唯一一条路径上是宏观体积膨胀占优的, 这一路径正好与预期的宏观裂纹的扩展路径相一致, 详细的分析讨论可参见文献 [22, 23].

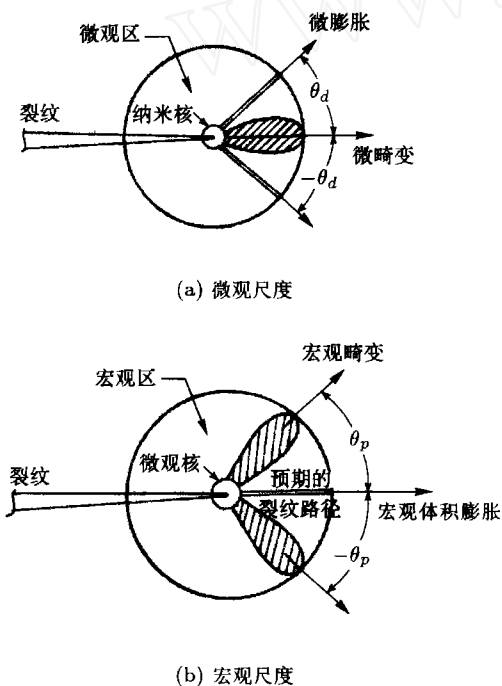


图 1 压电材料中裂纹前端微观、宏观的多尺度损伤情形

假设的必要性 关于自然界的描述, 尽管现在和过去的科学家们取得了一些进展, 但无论是“微粒的”也好, “连续的”也好, 一个真实的描述还没有出现. 仍有疑问的是尺寸、形状、运动、微观粒子的特性与一个无法感知的充满着活力的宇宙. 实际上也许没有必要知道自然界的真正奥秘, 能够考虑到自然界也许会如何也就足够了. 然而, 就是这样一个描述, 也必须具有一致性和不自相矛盾. 这样一来, 那个无法用技术语言来表达的最终因果关系, 也许就只能依赖于假设. 此外, 并不是所有的假设都应一视同仁, 特

别是那些仅仅用于解释一个特别现象的假设. 一个有用的假设应该在一个较大的范围内均能适用. 只有这样, 才会避免用一个有缺陷的假设来推演所有观测到的事实. 一个假设也许在其他情况下成立, 但只要有一个反证就足以推翻这一假设.

有这样一个假设, 说材料应该沿着与最大应力正交的方向断裂, 似乎能够自圆其说. 但对于动态裂纹问题这一假设就遇到了反驳, 靠近裂纹尖端的最大主应力是平行而不是垂直于预期的裂纹扩展路径. 因此, 应该优先选取能够同时正确预测静态与动态裂纹路径的最小应变能密度因子假设 [24~26]. 文献 [27] 也是用最小应变能密度因子假设, 正确地预测出了裂纹形成的位置: 试件在静荷载作用下, 裂纹出现在试件的中心; 在循环荷载作用下, 裂纹是出现在表面. 能量密度理论 [28,29] 有能力解决材料的失效分析问题, 不但可以分析裂纹的形成, 也可以用于分析裂纹的扩展, 并且已经证实这一理论在很大一个范围内均能符合已有的可用的试验观测数据 [30].

前面的讨论虽然划分出几个标题, 但根本的讨论点在于物理学与纳米尺度的联系. 用于模拟物理过程提出了许多不同的原子模型 [5~9], 其中存在的问题让人感到深深地担忧, 尤其是连续场方法与微粒方法被任意地结合 [20,21] 在一起, 二者都被假定为有效, 被交替使用. 这种令人不安也许是观念上的, 因为这种二元性是先验地加以接受的.

2 对微粒与连续场概念的评述

关于物质是连续的还是微粒的这一问题, 早在亚里斯多德 (Aristotle) 的时代 (公元 4 世纪) 就进行过争论. 对于每一个反驳其中一个概念的论据, 就对应地有一个令人信服的论据来支持它. 在中国的古典自然哲学 (公元 2 世纪或更早) 中, 把宇宙看成是由连续介质组成的, 其中的所有事物都有它自己内在的节奏. 事物之间通过波动相互作用, 通过辐射作用相互影响, 每一事物都是一个层次分明的结构的一个组成部分, 由此构成宇宙的图像. 认为宇宙是被卷入太极之中, 太极是由波浪状运动着的阴和阳组成的, 而所谓的阴和阳是来自于大地和太空, 阴和阳结合在一起, 创造出宇宙万物.

发源于古代地中海的斯多噶学派 (Stoics) 哲学与上面的中国古代哲学观点有着奇特的相似之处, 也把宇宙看成是由连续介质组成的. 然而, 直到在欧洲出现描述光、热和声的波动理论以前, 中国和希腊的这些早期观念无法进行数学上的量化和用于系统地解释物理现象.

2.1 统一场理论

现代基本粒子物理学,或者说揭示物质基本构造的目标,是试图通过在越来越高的能量束下观测越来越小的距离来实现.然而无法令人满意的现实是,发展的结果是得出了4个相互分离的作用场理论,即原子核内的强相互作用、弱相互作用、电磁力场与万有引力场.当这4种基本场的强度相等时,4种基本场被认为是将趋于统一.据推算,要使这种情况发生,就必须使能量达到 10^{15} GeV的量级,距离普朗克能量 10^{18} GeV还相差3个数量级.在过去的50年间,人们努力建造能量越来越高的电子加速器.表1中列出了一些主要的加速器,表中清楚地表明,人们试图使加速器的能量越来越接近将4种基本场统

一的能量水平,但加速器的能量却在TeV的量级上提高不上去了,TeV量级的加速器预期用超导材料制造,地点在美国德克萨斯的卫星监控中心(SSC in Texas),但未完成,目前项目已经停下来了.即使它能建成,其能量也只能达到 10^9 GeV的水平,达不到统一4种作用力场所要求的能量量级,而且万有引力场还没有包括在内.

在量子引力理论中,一个与空间-时间奇点有关的概念上的困难是,事件被描绘成虚粒子的交换,虚粒子之间具有相互作用力.这些虚粒子是由空洞自然而然产生的,而且是立即消失在空洞中.这种粒子的突然出现又突然消失,到目前为止仍然是一个猜测.

表1 过去50年来世界上建成的主要的电子加速器

电子加速器名称	建造日期	加速类型	最高能量
布鲁克海文质子同步加速器	1952~1967	质子	3 GeV
美国伯克利质子加速器	1954~1972	质子	6.4 GeV
欧洲粒子物理研究所质子同步加速器	1960	质子	30 GeV
布鲁克海文变梯度同步加速器	1960	质子	33 GeV
斯莱克 2 mile 线性加速器	1966	电子	30 GeV
费米实验室加速器	1972	质子	400 GeV
斯莱克电子-正电子不对称环形加速器	1972	电子-正电子	4.2-4.2 GeV
康奈尔电子贮藏式环形加速器(CESR)	1978	电子-正电子	8-8 GeV
DESY(汉堡)串联加速环	1979	电子-正电子	19-19 GeV
欧洲粒子物理研究所质子-反质子对撞机	1981	正电子-反质子	270-270 GeV
超导超级对撞机(未完成)	1986		TeV

2.2 连续介质空间

物质也可以看成是由空间组成的,那里具有非常强的连续场.这一思想已经隐含在中国古代的道家哲学中,在道家学说中,物理事件与现象都是变化无常的.道家学说源于太极是空的和无常的观念,太极照字面的解释是“气体”或“以太”,一个中国古代的专门术语,用来表示至关重要的“气”或者说推动宇宙的能量.太极是物质微妙的无法感知的形式,贯穿于

整个空间,能够凝聚成实际的物体.尽管后者并没有直接与将物质离散成微粒的思想相联系,但实际上隐含着量子力学中粒子的概念.

自然界中阴与阳的此生彼长假定经历4个阶段,由此可得出物理学中简谐运动的概念.时钟的发明正是需要这一概念.这4个阶段连续交替变化,如图2所示的正弦波曲线.表2中归纳出在“易经”^[31]中描述的自然界的循环往复行为.

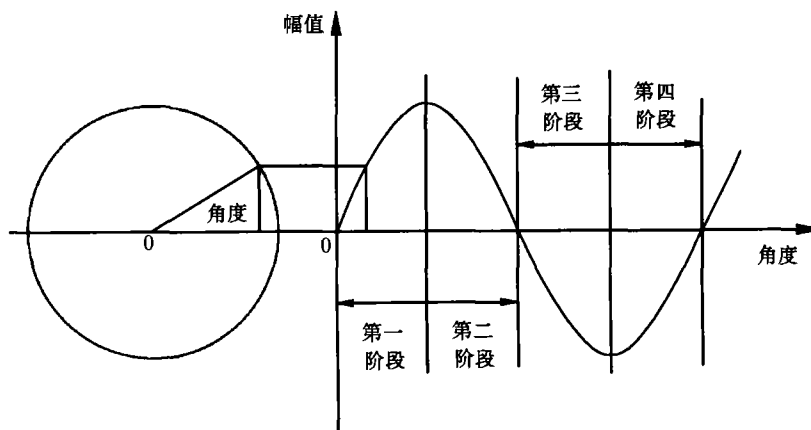


图2 与4个变化阶段相对应的简谐运动

表 2 由阴和阳驱动的循环行为

驱动力	变化的 4 个阶段			
第一阶段 (正增加)	春	掩蔽	初级	稳定
第二阶段 (正减少)	夏	破坏	高潮	僵持
第三阶段 (负增加)	秋	混沌 (或空虚)	平衡	变化
第四阶段 (负减少)	冬	再分化	突降	突破

这种对自然界循环往复特性的描述, 已经在对白矮星再生行为的观测中得到证实. 一颗白矮星 (超新星 1) 转换过程可用表 2 中的第 2 列来描述: 掩蔽, 破坏, 混沌 (或空虚) 与再分化. 表 3 中描述的那些事件如图 3 所示. 波动力学的概念和连续场理论, 如果没有“易经”中关于自然界循环往复变化的思想, 是不能创立出来的.

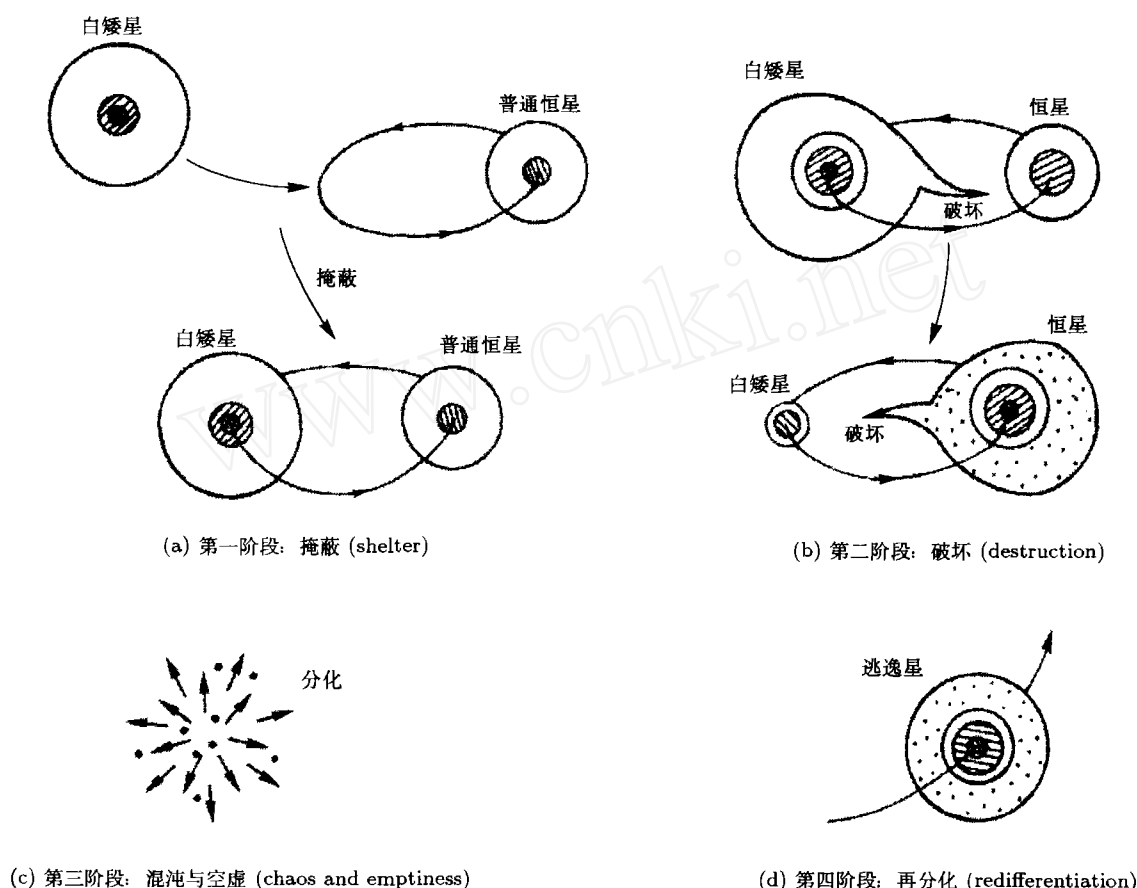


图 3 一颗白矮星的演变过程

表 3 一颗白矮星的再生

变化阶段	描述
掩蔽: 图 3(a)	一颗白矮星被吸入一颗普通恒星的轨道
破坏: 图 3(b)	白矮星的氢与氦的包层 (现为红巨星) 膨胀并溢出质量填充质量小的恒星, 直到填充的过程逆转时, 一个破坏过程就发生了
混沌: 图 3(c)	当相互的破坏重复时, 白矮星的温度增加到 10^3 百万度, 并产生“碳爆炸”和分解
再分化: 图 3(d)	一颗逃逸星被释放, 过程重复下去

为一个观念, 并不比极限 0 的数学概念更难理解.

一个宏观物体的运动是如此地简单明了, 以至于无法体现出微粒的详细特性. 然而, 反之是不成立的. 分子的布朗运动已经推动了非平衡热力学理论的发展. 在非平衡热力学理论中, 是将温度直接与位移或位移梯度相联系

$$\frac{d\theta}{\theta} = -\lambda \frac{dV}{dA} \frac{de}{dD/de} \quad (1)$$

式中 θ 表示绝对温度, e 表示位移梯度, 负号表示对系统做功. 体积随表面积的变化 dV/dA 可以用位移梯度显式地表示. 式 (1) 是以等能密度空间 (isoenergy density space) 为参照系的. 耗散能密度函数 D 可由试验测定 [32,33], 或通过数值方法计算出来, 这

2.3 微粒 - 连续介质方法

不难设想, 粒子与连续场, 并不是相互排斥的; 二者是持续变化着的同一事物的两个方面. 至少, 作

一数值方法是针对机械荷载的卸载而建立的^[34]。随后, 温度 θ 可由式 (1) 确定, 而无须借助古典热传导方程与古典热力学理论。此外, 式 (1) 适用于各种力场: 强相互作用力场、弱相互作用力场、电磁力场与万有引力场。式 (1) 中的 λ 为一加权因子, 其定义见表 4。

表 4 作用力场的加权因子

作用力场	应用和空间范围
强相互作用力 λ_I	原子核结合, 裂变与聚变: 10^{-13} cm
电磁作用力 λ_{II}	电场, 磁场, 光: 无限
弱相互作用力 λ_{III}	辐射衰减: 10^{-16} cm
万有引力 λ_{IV}	行星轨道与恒星运动: 无限

与古典方法的区别, 表现在式 (1) 中的 $\lambda(dV/dA)$ 这一项上, $\lambda(dV/dA)$ 可以被看作是更广义函数 $f(e)$ 的空间形式, 函数 $f(e)$ 仅依赖于等能密度空间中的等应变 e (isostrain) 或位移梯度。基于这种认识, 体积能量密度可以表达为

$$\frac{dW}{dV} = \iint f(e) de de \quad (2)$$

函数 $f(e)$ 或 dV/dA 与等应变 e 关系的更一般描述如图 4 所示, 它包括了弹性理论中应力 σ 与应变 ϵ 的关系, 电弹性理论中电位移 D 与电场强度 E 的关系, 磁弹性理论中磁通量密度 B 与磁场强度 H 的关系, 等等。符号 ϵ 用于表示单轴应变, 而等应变 e 可以变换到物理空间中导出三维情况下的位移梯度。

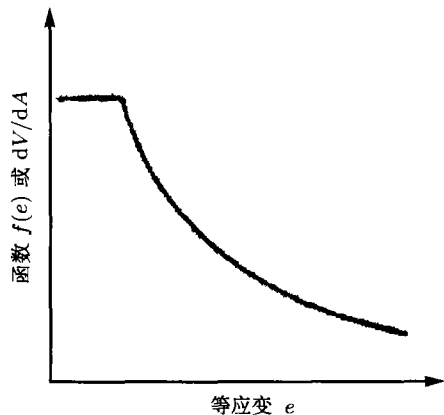


图 4 应变函数随等应变的变化

图 4 中曲线近乎为水平的那一部分对应于 σ 与 ϵ , D 与 E 或 B 与 H 关系的线性部分。不失一般性地, 所有的物理事件均可量化成对物质的波状干扰, 而不论是表 4 中的哪一种作用力场。只要所定义的特征长度和波动速度能正确地确定下来, 那么物质组成成分的运动就可假定是由作用力来推动的。凡是可用光探测的现象, 其特征长度的量级为 $(10^{-5} \sim 10^{-6})$ cm, 波动速度的量级为 $(10^2 \sim 10^3)$ m/s。等能密度理论中

包括了尺度与时间的相互作用在内, 在对物理事件的描述中没有任何模糊不清的地方。至于温度的变化亦需要考虑能量的消耗。

应当强调指出, 位移是等能密度理论中的一个主要的物理量^[15]。一旦确定了位移, 在耗散能密度 D 已知的前提下, 温度就可由式 (1) 而随之确定。它的物理解释就是系统的不可逆性。首先, 耗散能密度可由 dW/dV 中的不可逆部分来确定, 这一不可逆部分是由材料微结构 (或许是原子或亚原子结构) 的永久性变化引起的。问题的关键在于物理量 D 的确定, 可采用解析法、试验法或二者相结合。只要量 D 随时间变化的趋势能正确地确定出来, 可以看到无论采用何种方法, 都不会对结果产生影响。

解析法 这一方法是作用一个机械荷载或其他形式的荷载, 用以抵消前一个时间步内作用的荷载来模拟卸载。二者的差值就是消耗的能量。同时, 加载与卸载步的步数多少对结果有影响, 但一致性是主要的。这一方法已用于解决许多非平衡物理问题^[34~42], 包括由于局部能量的过多转换而引起的相变。

基于应变的试验法 美国海军研究实验室 (US naval research laboratory, NRL) 提出了一种试验法, 用于测定耗散能量密度^[32,33], 正好是对应于式 (1) 中的 D 。这一方法原先是想观测加载下开裂的复合材料试件中的内部损伤。用 NRL 研制的面内加载机进行试验, 获得了大量试验数据, 这一加载机是由计算机控制的, 可以产生多种加载形式的组合, 如张开 / 闭合、滑移和旋转等, 获得的数据可用于计算耗散能密度。这包括拟合出一个应变函数, 通过含有待定系数的其他函数, 使耗散能量密度函数的试验测定值与理论估计值二者的差值最小化, 可拟合出这一应变函数。试验仪器以及相关数值计算的详细情况可参见文献 [33]。这一成果已应用到海军舰艇的设计上, 包括舰艇的桅杆和潜艇艇身设计。

3 热能传递的尺度相关性

数学和计算机模拟计算表明, 纳米材料与纳米仪器具有优越的强度与高速性能。这些特点, 使纳米材料与纳米仪器在技术上和经济上都有广阔的应用前景。这一应用前景, 促使工程师们去了解量子力学效应。

3.1 电子与声子对热传导的影响

电子和声子被假定是在各自的范围内振动的量子, 从温度高的区域移向温度低的区域, 其位移可以是原子间距的很多倍, 以此来传递热量。对于金属材料, 主要是由电子来传递热量, 而在介电材料中则主

要是靠声子. 固定体积下每单位体积的热容量, 由电子贡献的部分是

$$C_v^{\text{el}} = \frac{\pi^2 N_0 k_b^2 T}{2E_f} \quad (3)$$

因此, 热容量 C_v^{el} 线性地依赖于绝对温度 T , E_f 表示费米 (Fermi) 能量. 式 (3) 中, $N_0 = 6.022 \times 10^{23}$ J/K, 是 Avogadro 常数, $k_b = 1.381 \times 10^{-23}$ J/K, 为 Boltzmann 常数. 统计力学给出的热传导系数 k^{el} 与单位体积的热容量 C_v^{el} 之间的关系为

$$k^{\text{el}} = \frac{1}{3} C_v^{\text{el}} v^{\text{el}} \ell^{\text{el}} \quad (4)$$

式中 C_v^{el} 随温度而增加, 而速度 v^{el} 与平均自由行程 ℓ^{el} 均随温度而减小. 从而, k^{el} 近乎保持不变. 仅仅是那些具有接近费米能量 E_f 的电子有能力参与热传导过程. 因此, v^{el} 在计算中可以取为费米速度 v_f

$$E_f = \frac{1}{2} m v_f^2 \quad (5)$$

式 (4) 中由电子产生的热传导系数 k^{el} 是一个标量. 对于 3 个正交方向, 通过耗散能密度容量 C_θ (dissipation energy density capacity), 体积与表面积之比 dV/dA 的变化率及 3 个速度分量 dx_i/dt ($i = x, y, z$), 可推导出 k^{el} 的一般表达式. 须通过一系列试验数据来获得函数 D 的表达式 [33], 因为 D 是温度的函数, 所以可由试验数据计算出 $dD/d\theta$ 的值, 则 $C_\theta = dD/d\theta$, 就已知了. 用符号 T 表示的温度应该与用符号 θ 表示的温度区别开来, θ 是等能密度理论中的温度, 考虑了 dV/dA 效应, 对此在后面还要进行更多的讨论.

与上面完全相似, 也可用量子力学方法得出声子产生的热容量表达式

$$C_v^{\text{ph}} = 3N_0 k_b T_e \frac{\exp T_e}{(\exp T_e - 1)^2} \quad (6)$$

式中 T_e 为爱因斯坦温度, 其定义为

$$T_e = \frac{h\omega}{2\pi k_b T} \quad (7)$$

式中 ω 为声子的振动频率, $h = 6.626 \times 10^{-34}$ Js, 为普朗克常数. 对于非常小的温度, 式 (6) 可简化成为一个指数形式. 但这与试验观测不符, 试验发现 C_v^{ph} 随温度的三次方减小. Debye 已经改正了这一缺陷, 但与这里的讨论不直接相关, 因为声子流动引起的热传导系数可表达为式 (8) 这一更为普遍的形式来取代式 (6)

$$k^{\text{ph}} = \frac{1}{3} C_v^{\text{ph}} v^{\text{ph}} \ell^{\text{ph}} \quad (8)$$

声子的速度有 3 个分量, 在平均的意义上, 声子速度 v^{ph} 大约与声速相同, 为 5×10^5 cm/s, 且与温度无关. 声子平均自由行程 ℓ^{ph} 在室温下大约是 10 nm, 在接近 20 K 的温度下为 10^4 nm. 声子导致原子位移, 产生一个瞬态变化, 或者说是一个非平衡过程. 如果环境温度增加, 声子就倾向于流向晶格内部. 原子振动的加剧又随之使晶格的温度升高. 反之, 环境温度的降低加强了声子从晶格的发射. 声子流动的这些特性可以增强或阻碍热传导.

3.2 声子的缺陷

电子与声子的激励作用使原子产生位移. 在这个意义上, 电子和声子被看成是具有缺陷的, 分别称之为电子缺陷与声子缺陷. 尽管关于半导体电学性质而不是材料性质方面的研究还非常缺乏, 但据推测, 电子与声子缺陷与塑性变形相联系, 就像位错那样会影响到结晶组织的强度. 文献 [43] 中研究了具有缺陷的声子之间的相互作用, 为揭示局部化的类似声子形态的区域 (localized phonon-like modes) 的存在, 采用分子动力学方法, 在位错发射和裂纹分岔之前, 对一个动态裂纹尖端区域的原子速度、作用力与势能进行了计算. 一个快速运动裂纹前端的断裂能倾向于激励声子象声波那样运动. 裂纹前端的热效应与裂纹长度有关. 裂纹前沿边界上的缺陷也能成为位错成核源, 这可用高分辨率射电电子显微镜观测到. 有证据表明, 一个深埋裂纹的前端也存在位错圈的发射. 与二维的情况相对照, 对三维效应的分析也许会影响到对晶体机械强度和电学性能的解释.

声子谱的详细特性还与吸附在固体表面的一层物质的动力学特性有关 [44,45]. 声子谱有助于人们了解固体表面的吸附层与固体基层之间的结合情况. 已由高分辨率电子能量损耗分光镜获得了声子的散射曲线, 同时采用嵌入原子方法进行了理论计算, 以检验试验表面的声子散射曲线.

3.3 温度随体积的变化

早在 140 年前的 1857 年建立的 Kevin 定律 [46], 指明温度变化 ΔT 仅与体积的改变 ΔV 有关, 这一观念一直占据在人们的头脑里. 这一观念不仅影响到 Boltzmann 对热传导问题的推导, 还影响到对试件尺寸效应的 Weibull 分布的统计处理. 在表达式中仅含有试件的体积项, Kevin 方程为

$$\frac{\Delta T}{T} = -Y \frac{\Delta V}{V} \quad (9)$$

式中 V 是体积, Y 是 Gruneisen 参数, $Y = \alpha K_T / c_v$. K_T 是等温压缩模量, c_v 是定容条件下每单位体积的比热系数. 体积膨胀 $\Delta V / V = (1 - 2\nu)\epsilon$, ν 为 Poisson 比, ϵ 为加载方向上的单轴应变. 实际上, 式 (9)

通过 $\Delta V/V$ 仅考虑了体积变化这一个因素, 而忽略了变形的影响, 即表面积 ΔA 的变化.

式 (9) 来源于监测低碳钢钢棒在拉伸与压缩时的温度变化时而得出的经验公式^[46]

$$\frac{\Delta T}{T} = -\frac{\alpha\sigma}{2c_{\sigma}J} \quad (10)$$

式 (10) 中符号 σ 表示在弹性应变范围内的突加应力, α 是线膨胀系数, c_{σ} 是在恒定应力下使每单位重量物质温度升高 1K 所需的热量, J 是热功当量. 在 3 个拉伸试验与 3 个压缩试验中, 温度由热电偶记录下来, 结果如图 5(a) 和图 5(b) 所示. 在图 5(a)

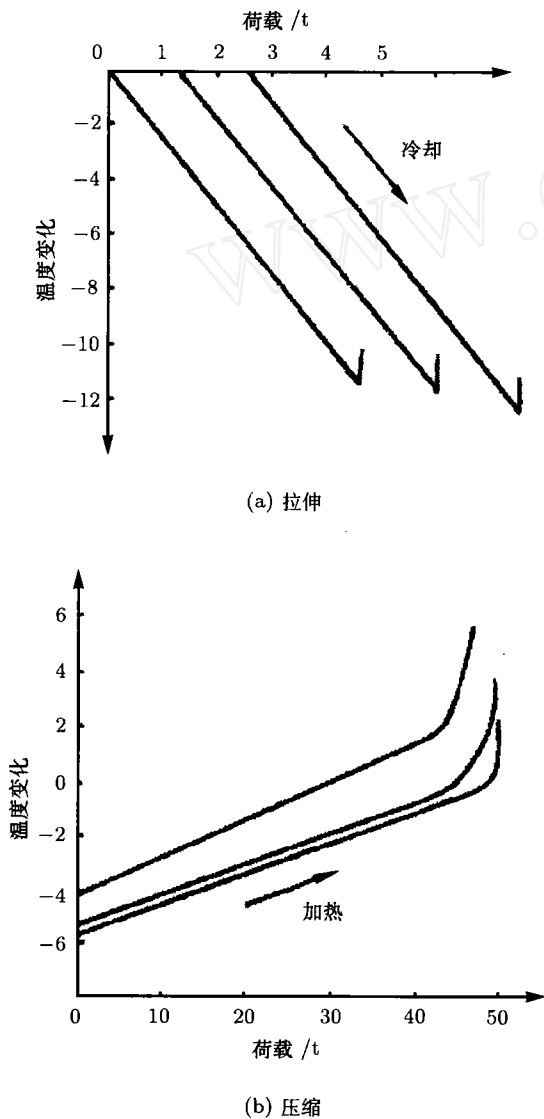


图 5 低碳钢钢棒快速加载下的温度变化^[47]

和图 5 (b) 的温度曲线上出现了突变. 这意味着, 在那一瞬间达到了材料的屈服点. 这一解释对于文献 [36, 37] 得出的试验结果并不成立, 文献 [36, 37] 进行的试验是针对钢和铝试件, 温度由热敏电阻来记录, 其精度高达 $\pm 10^{-3}$ K. 对 SAFC-40R 钢^[36] 和 6061-T6

铝^[37] 的单轴拉伸试验显示, 在宏观尺度下, 在应力 - 应变曲线的线性部分上, 响应的不可逆性也是显著的. 即使在线弹性范围内, 加载和卸载路径的差别不大, 但假定二者是完全一样的, 这在概念上是不正确的. 另外, 这一效应在时间尺度上被忽略了, 实际上试件温度有几分钟的时间是低于周围环境温度的, 这取决于所施加的位移变化率^[37]. 6061-T6 铝在 8.467×10^{-5} m/s 的位移变化率下的温度变化情况如图 6(a) 所示, 相应的应力 - 应变曲线如图 6(b)

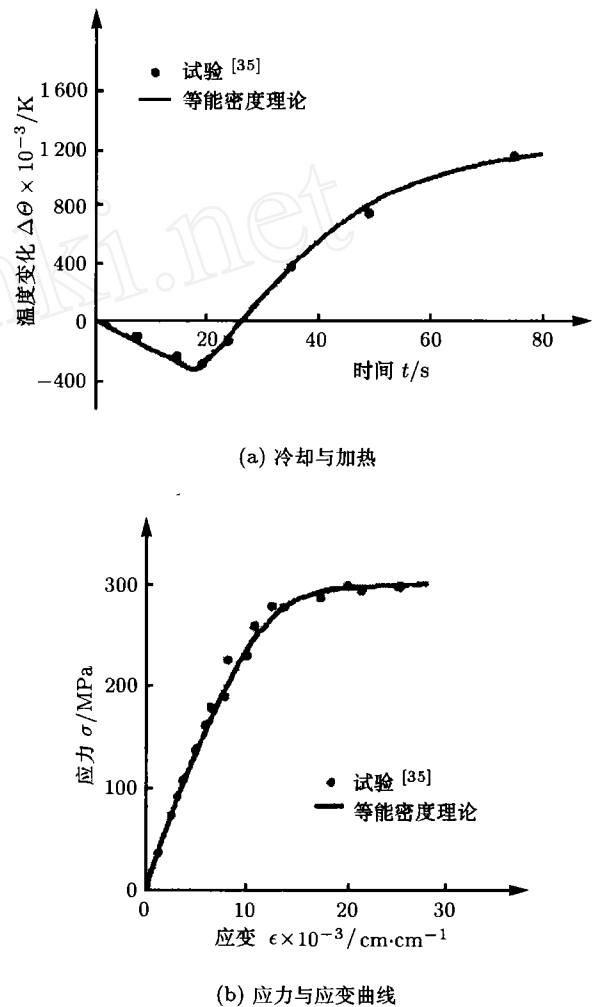


图 6 6061 铝条以 8.467×10^{-5} m/s 被拉伸时的非平衡温度与应力 - 应变数据

所示. 时间 $t = 45.12$ s 时, 应力为 292.0 MPa, 应变为 12.0×10^{-3} cm/cm, 该点对应于曲线图上的平滑部分. 在 $t \approx 20$ s 的地方, 温度曲线的曲率方向发生了改变. 问题是, 通常认为温度曲线上的这个波谷与材料的屈服点有关, 这一点对于铝材料似乎不成立. 应当强调指出, 图 6(a) 中 $t \approx (20 \sim 80)$ s 的曲线上升部分由 Kevin 方程是无法得出的, 这是由于忽略了表面积变化的效应. 如果所施加的位移变化率降低一个数量级, 对于铝试件, 在加载后, 需要 200s 多即

大约 3.3 min, 试件才返回到周围的环境温度. 一时间滞后并不是不明显的, 显示出单轴应力 - 应变关系的非平衡特性, 在系统与周围环境之间发生了热量的交换. 这是一个普遍规律而不是一个例外.

回顾一下, 在古典弹性理论中不得不采用一个闭合的热力学系统, 这一系统是跟周围环境的热扰动相隔绝. 这样就在连续介质力学中排除了非平衡理论. 以令体积与表面积之比的变化率趋于 0 或 $dV/dA \rightarrow 0$, 使热 - 固耦合效应解耦为代价, 古典连续介质力学体系于是达到了一致性. 温度变化与力学变形之间的这种分离, 使我们不得不发展热传导理论来确定温度的变化. dV/dA 的消失意味着, Fourier 定律中的热传导系数、热辐射中的 Stefan-Boltzmann 常数与热对流中的膜层散热系数的极限值均趋于 0. 因为物体的表面是构成物体必不可少的一部分, 所以必须保留 dV/dA 的有限性. 表面能与体积能不是彼此无关的, 它们之间的交换决定了形核过程中结晶体的尺寸, 这是众所周知的. 因为令 $dV/dA \rightarrow 0$, 连续介质力学中的尺度效应就被抹杀了, 这意味着连续介质单元没有尺寸, 因此也就没有形状.

3.4 体积与表面的共存

表面与体积在描述三维物体时是作为一个整体, 就像描述一维物体的长度一样. 它们一起膨胀, 一起收缩, 当受到干扰时每一个物质单元都发生这种情形的变化. 这种变化伴随着温度的波动, 所以不能单一用变形或温度来描述物质的整个性质. 这是自然界真实的非平衡特性.

在物理学范畴上, 体积与表面积之比 dV/dA 的变化率不能为 0. 三维情况下, $i = x, y, z$, dV/dA 的 3 个分量在它们各自的方向上都是占主导的, 因此可以假设

$$\left(\frac{dW}{dA}\right)_i = \left(\frac{dV}{dA}\right)_i \frac{dW}{dV}, \quad i = x, y, z \quad (11)$$

式中 $(dW/dA)_i$ 是表面能密度 dW/dA 的分量, 它是一个矢量, 而体积能量密度是一个标量.

式(11)与晶体成核有关. 一个晶核的均匀核化引起的自由能增量 dF , 可表达为体积自由能增量 dF_V 与形成新的表面所需的表面自由能增量 dF_A 之和, 对于一个半径为 R 的晶核, 有

$$dF = 4\pi R^2 dF_A - \frac{4}{3}\pi R^3 dF_V \quad (12)$$

式中的负号是因为从一个不稳定状态到稳定状态的变换. 晶核连续增长的条件是半径应该超过 R_0 , 于是 dF 对 dR 的一阶导数应该为 0, 由此导出

$$\left(\frac{R}{2}\right)_{R \rightarrow R_0} = \frac{dF_A}{dF_V} \quad (13)$$

成核的临界自由能或活化能由下式给出

$$dF_c = \frac{16\pi}{3} \frac{dF_A^3}{dF_V^2} \quad (14)$$

在一维情况下和 R 方向上, 式(13)实际上等价于式(11)^[50]

$$\left(\frac{dV}{dA}\right)_R = \frac{(dW/dA)_R}{dW/dV} \quad (15)$$

对于球体, $V = 4\pi R^3/3$, $A = 4\pi R^2$, 可导出 $dV/dA = R/2$. 式(15)中, $(dW/dA)_R$ 与 dW/dV 分别对应于 dF_A 与 dF_V . 这里关键是 $dV/dA = R/2$, 不能是 0. 因为表面能与体积能之间的交换决定着晶体的尺寸. 如果将 dV/dA 取为 0, 则晶体的成核过程是不可能发生的.

等能密度理论 (isoenergy density theory)^[15] 中体积能与表面能的共存, 使我们对传导、辐射与对流这些传热机理有了更深刻的理解.

热传导 Fourier 定律中的热传导系数 k_i 的一般表达式可写成如下形式

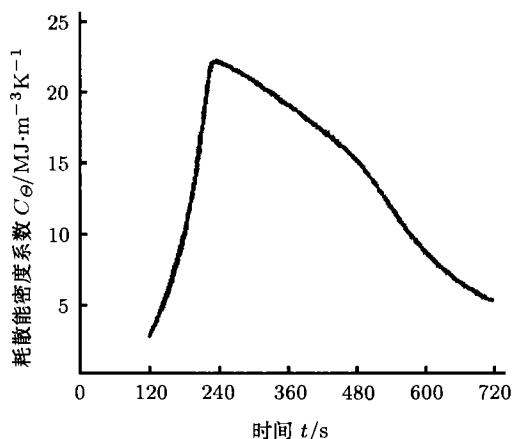
$$k_i = C_\theta \left(\frac{dV}{dA}\right)_i \left(\frac{dx_i}{dt}\right), \quad i = x, y, z \quad (16)$$

式中 C_θ 是能量耗散容量系数 (energy dissipation capacity coefficient), 其定义是

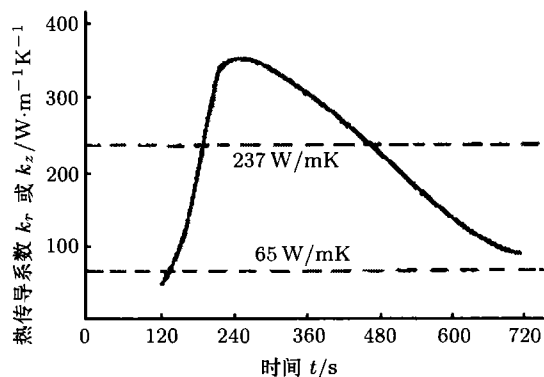
$$C_\theta = \frac{dD}{d\theta} \quad (17)$$

前面提到过, D 是 θ 的函数, 可由美国海军研究实验室 NRL 发展的试验方法来确定^[32,33]. 针对一个长 10 cm、半径为 1.25 cm 的 6061 铝圆柱棒的问题进行了求解, 铝圆柱棒暴露在空气中, 处在 25°C 的室温环境下. 有 10 cm × 10 cm 的空气介质被允许与铝棒结合, 并施加 1.27×10^{-4} cm/s 的位移变化率. 采用等能密度理论, 对跨越固体 / 空气界面的热量变化进行了计算. 这里的目标是为了证明, 式(17)中的 C_θ , 还有式(16)中的 $(dV/dA)_i$ 与 dx_i/dt ($i = r, z$), 可以用解析法计算出来, 这里 r 表示铝棒的径向, z 表示轴向. 于是, 热传导系数 k_r (或 k_z) 可以确定出来. 因为可以用来取代试验, 所以是非常有价值的, 因为试验总是昂贵的, 并且很费时间.

图 7(a) 给出的是能量耗散容量系数随时间变化的总体平均结果, 在 (180~240)s 之间出现一个峰值, 然后下降. 整体热传导系数 k_r (或 k_z) 的瞬态性质如图 7(b) 所示, k_r 的峰值出现在 $t = 240$ s 附近, 随时间的增加, k_r 趋向于平衡, 处在工程手册中给出的 237 W/mK 与 65 W/mK 的上、下限范围之内.



(a) 耗散能密度系数



(b) 热传导系数

图 7 25 °C 下 6061 铝棒以 1.27×10^{-4} cm/s 被拉伸时, 整体耗散能密度系数与热传导系数的时间历程

对流传热 对流传热中的膜层散热系数 h_i 同样在 3 个正交方向上变化

$$h_i = c_\theta \left(\frac{dV}{dA} \right)_i \frac{1}{dt}, \quad i = x, y, z \quad (18)$$

式 (18) 意味着对流传热通过 $(dV/dA)_i$ 与表面能、体积能之间的交换相联系。

因为 C_θ 已经由图 7(a) 可知, 数据可用来计算 h_r 沿轴向的平均值. 结果如图 8 所示, 图 8 中给出的是靠近固体 / 空气界面的地方 h_r 值的变化情况. 对于靠近铝棒壁厚度为 0.785 cm 的薄膜得出的 h_r 的平均值为 $205.9 \text{ W/m}^2\text{K}$, 这个平均值所对应的距离, 正好使得水平直线 $205.9 \text{ W/m}^2\text{K}$ 以上和以下的面积相等。

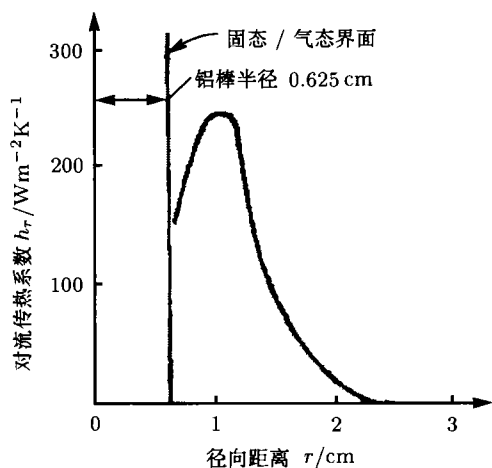


图 8 25 °C 下 6061 铝棒以 1.27×10^{-4} cm/s 被拉伸时, 平均传热系数沿径向的变化

热辐射 热辐射中的 Stefan-Boltzmann 系数 η_i 取如

下的形式

$$\eta_i = \frac{dD}{dt} \left(\frac{dV}{dA} \right)_i \frac{1}{\theta^4 - \theta_0^4}, \quad i = x, y, z \quad (19)$$

针对钨弹打在一个由 4340 钢制成的靶板上的问题, 通过确定这一高速冲击过程中由微结构相变引起的热辐射, 验证了式 (19) 的有效性 [51]. 实验中钨弹宽 14 cm, 长 47 cm; 靶板厚 20 mm, 宽 60 cm. 对于小的时间步长, 直到靶板完全穿透, 式 (19) 都有很好的精度. 在大约 $30.31 \mu\text{s}$ 时对应的温度是 $\theta = 892.73 \text{ K}$. 在钨弹的冲击下从靶板上脱落下来一块塞子状的材料. 在弹孔附近区域发现有一个狭长剪切带, 以前称之为绝热剪切带 (adiabatic shear bands), 如此命名是基于这样一个推测, 就是根本没有时间进行热传导. 然而, 在穿甲过程中在材料的一个狭长带中 4340 钢材料的奥氏体化已经被证实是由辐射引起的热耗散所致, 热辐射的速度要远远高于热传导. 因此, 用绝热这个词来描述这一过程是不恰当的. 以上结论可由 Stefan-Boltzmann 系数的计算结果来加以验证. 对轴向和径向 Stefan-Boltzmann 系数进行了计算, 结果是: $\eta_z = 5.1312 \times 10^{-8} \text{ W/mK}$, $\eta_r = 5.08 \times 10^{-8} \text{ W/mK}$. 这一结果与手册里的平均值 $\eta = 5.669 \times 10^{-8} \text{ W/mK}$ 相当吻合. 计算得出的穿甲过程中热传导系数 k_r 与 k_z 的值则与手册平均值不相符合. 这说明在穿甲过程中主要是热辐射而不是热传导。

3.5 电子与声子热传导系数的一般形式

根据式 (16), 式 (4) 中 k^{el} 与式 (8) 中 k^{ph} 的一般形式可写成

$$k_i^{\text{el}} = C_\theta^{\text{el}} \left(\frac{dV}{dA} \right)_i \left(\frac{dx_i}{dt} \right)^{\text{el}}, \quad i = x, y, z \quad (20)$$

与

$$k_i^{\text{ph}} = C_{\Theta}^{\text{ph}} \left(\frac{dV}{dA} \right)_i^{\text{ph}} \left(\frac{dx_i}{dt} \right)^{\text{ph}}, \quad i = x, y, z \quad (21)$$

式(20)与式(21)说明,电子与声子可沿3个方向以不同的速度运动.因为它们的位移在 x, y, z 这3个方向上也不相同,体积随表面积的变化 dV/dA 也相应变化,它起着式(4)中 ℓ^{el} 与式(8)中 ℓ^{ph} 的作用. k_i^{el} 与 k_i^{ph} 也都随 x, y, z, t 变化,反映了热传导的各向异性与不均匀性.

4 电磁学中的瞬态热效应

铁磁材料中的瞬态热效应同样可以用等能密度理论来处理,包括温度变化与能量耗散.处理的细节并不比古典电磁学理论中遇到的问题更复杂,在古典电磁学问题中也要求解庞大的方程组(Maxwell方程组).这涉及到 Gauss 定理, Ampere 定理, Ohm 定理与 Faraday 定理,除此之外,还包括机械、电、磁效应在内的本构关系.

在电磁学理论中,需要预先选定一个使介质产生位移的电场或磁场.为简便起见,将在等能密度的数学空间中对问题进行求解.想象连续介质被长方形平行管状单元所充满,单元的尺寸与位置随地点的不同而变化,可根据变形与旋转的时间历程来确定,如文献[52]中所示,材料的变形与旋转是由 Permalloy 65 合金材料的磁化引起的.除了等能密度方法以外,没有其他已知的方法能够确定出非平衡磁性饱和特性,以及用理论预测出材料的电阻率、磁导率等电磁特性.

4.1 物理与热学特性的不均匀性

磁化的瞬变性是由于材料电磁参数随空间位置和时间而变化,可用体积能密度函数进行分析

$$\frac{dW}{dV} = \int hdb \quad (22)$$

式中 b 与 h 分别为等能密度空间中的磁通量密度与磁场强度.问题是可解的,因为式(2)中的 $f(e)$ 仅与位移梯度有关,可通过式(22)与 b 和 h 相联系.

下面将说明怎样来确定 b 和 h .

考虑一个给定时刻系统中的一个等能密度单元(isoenergy density element) $(dW/dV, e)(h, e)$ 与 (h, b) , 其中 e 为等应变(isostrain).状态空间 $(dW/dV, e)$ 内的状态 P_1 可与空间 (h, e) 中的 P_2 与空间 (h, b) 中的 P_3 建立联系.因此, b 的一个特定的值可由 e 确定.如图9中所示,对于给定的 e, b 与 h 可由 dW/dV 求出.通过坐标变换,物理平面中的磁通量密度 B 与磁场强度 H 可由等能量空间中的 b 与 h 求出.

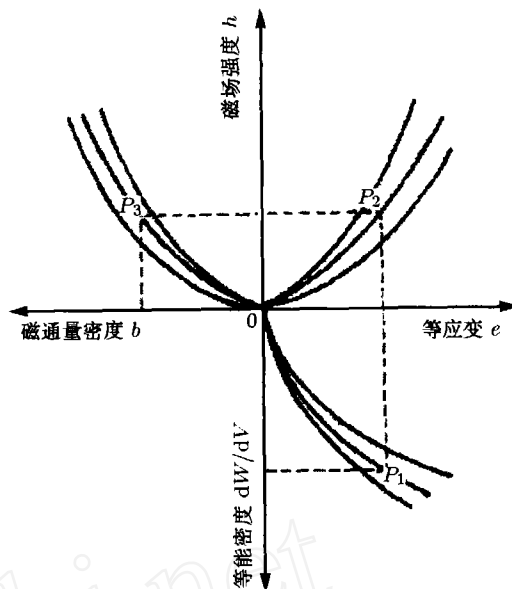


图9 磁学与等能密度理论中物理量的对应

磁导率 对于轴对称的圆柱形导体,有

$$\mu_r = \frac{B_r}{H_r}, \quad \mu_z = \frac{B_z}{H_z} \quad (23)$$

因为不用知道 μ_r 与 μ_z 即可求出 B_i 与 H_i ($i = r, z$), 所以磁导率系数可由式(23)获得.式中下标 r 与 z 分别表示圆柱导体的径向与轴向.

电导率 一旦知道了 B ,则磁通量 Φ 为

$$\Phi = \int_A B dA \quad (24)$$

式中 A 为圆柱体的表面积.由Faraday定律给出电场强度为

$$E_r \approx 0, \quad E_\theta = -\frac{1}{2\pi r_0} \frac{\partial \Phi}{\partial t} \quad (25)$$

其中 r_0 为圆柱体的半径.由Ampere定律可求出电流密度

$$J_r \approx 0, \quad J_\theta = \frac{\partial H_r}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial r} \quad (26)$$

因为 J_r 与 E_r 可以忽略,电阻率 \mathcal{R} (或电导率)可直接由下式求得

$$\mathcal{R} = \frac{E_\theta}{J_\theta} \quad (27)$$

请注意 \mathcal{R} 仍然与位置 r, z 及时间 t 有关.

电容率 因为已由式(26)求出了 J_θ ,而由式(25)又求出了 E_θ ,则电容率 ϵ 可由下式提取

$$J_\theta = \epsilon \frac{\partial E_\theta}{\partial t} \quad (28)$$

热传导系数 根据式 (16) 定义的 k_i , 热传导系数 k_r 与 k_z 可由下式求出

$$k_r = C_\theta \left(\frac{dV}{dA} \right)_r \frac{dx_r}{dt} \quad (29)$$

$$k_z = C_\theta \left(\frac{dV}{dA} \right)_z \frac{dx_z}{dt}$$

式 (29) 为各向异性与非均质材料热传导系数的计算公式。

4.2 Permalloy 65 合金圆柱棒的磁化

一铁磁材料制成的圆柱棒, 直径 2 cm, 长 16 cm, 其上绕有通电线圈。这相当于一个磁场强度为 H 的磁场, 由一个长 26 cm, 直径 5.08 cm 的圆柱形区域来模拟。这是一个二相介质问题, 如图 10 所示。Permalloy 65 合金含有 45% 的 Ni , 其余为铁和杂质。初始磁导率与最大磁导率分别为 $2.5 \times 10^3 \text{ Wb}^2/\text{Nm}^2$ 与 $500 \times 10^3 \text{ Wb}^2/\text{Nm}^2$ 。工程手册里推荐的平均值为 13 300 G。尽管在文献 [53] 中没有报告试件的尺寸, 但其中整体 H 与 B 、 H 与 ϵ (通常应变) 数据足以说明问题, 图 11(a) 与 11(b) 中给出了这两个关系曲线。在一个均匀磁场中的 Permalloy 65 合金圆柱体, 对其电磁物理参数的时空变化特性进行了理论预测, 预测的平均或整体值与手册 [53] 中给出的试验值惊人地一致。

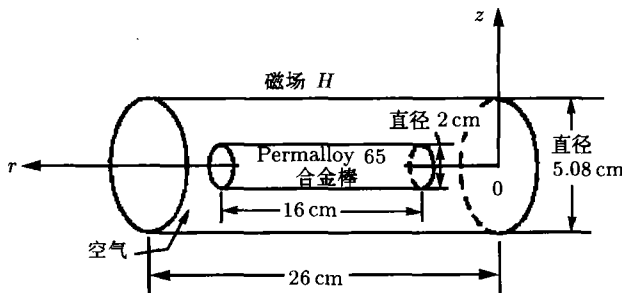
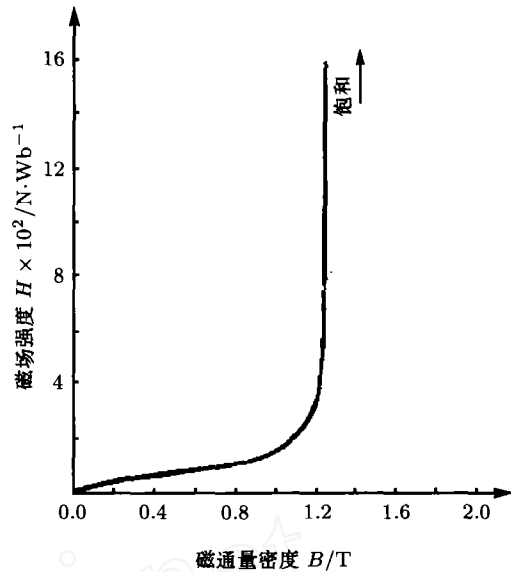


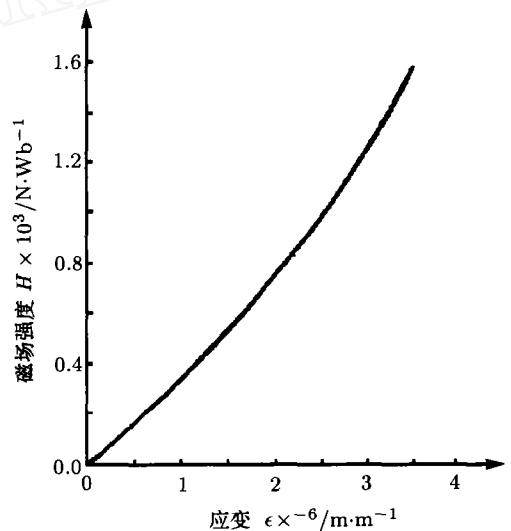
图 10 电磁场中的 Permalloy 65 合金棒

磁场强度与磁通量密度 Permalloy 65 合金圆柱体每一单元中 B_i 与 H_i ($i = r, z$) 随 r, z, t 的变化, 用等能密度理论进行了预测。这里仅讨论它们的整体平均值 (B_r, H_r) 与 (B_z, H_z)。图 12 中给出轴向的 B_z 与 H_z 随时间变化的情况。径向的 B_r 与 H_r 很小, 可忽略不计。尽管文献 [53] 中没有给出气隙电感线圈的气隙尺寸, 等能密度理论的预测结果还是与文献 [53] 中的试验数据吻合良好。大家知道, 试件与主线圈之间的气隙间距对数据是有影响的。同样的结论也适用于 (B_r, H_r) 与 (B, H) 曲线, 如图 13 所示。

磁导率与电阻率随时间的变化 图 14 所示的是磁导率 μ_r, μ_z 与时间 t 的函数关系。磁导率是各向同



(a) H-B 曲线



(b) H- ϵ 曲线

图 11 Permalloy 65 合金的磁场与磁通量密度的试验数据 [51]

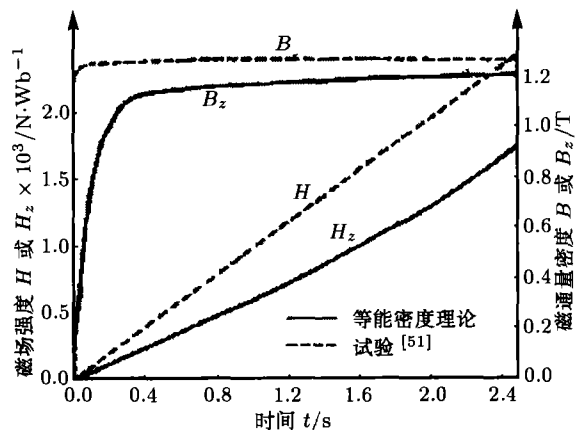


图 12 Permalloy 65 合金磁化时间响应的比较: 预测与试验

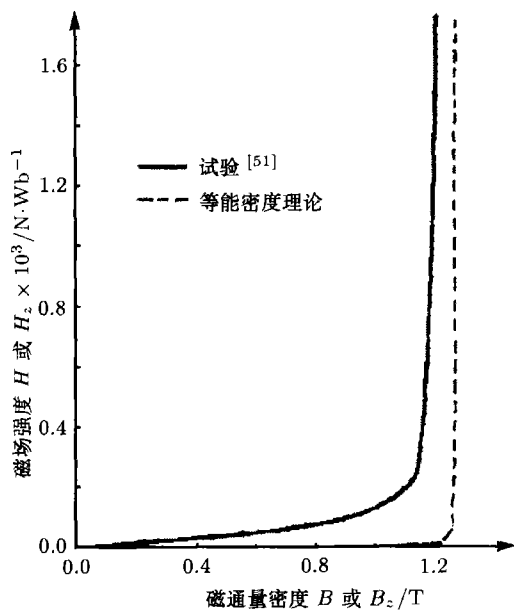


图 13 Permalloy 65 合金的磁化曲线: 预测与试验

性的, 因为对于 Permalloy 65 合金, μ_r 与 μ_z 基本上不随时间变化. μ_r 与 μ_z 之间可忽略不计的差别在意料之中, 因为没有特意去选取材料的微结构以影响其磁化响应. μ 的最大值 (对于 B), 即 $\mu^{\max} = 5.97 \times 10^{-2} \text{ Wb}^2/\text{Nm}^2$ 参见文献 [54] (pp. 114), 这与 $\mu_r^{\max} \approx \mu_z^{\max} = 1.3 \times 10^{-2} \text{ Wb}^2/\text{Nm}^2$ 的预测值在同一个数量级上. 请注意, 对于同样的铁磁材料, 如果热处理不同的话, 会影响到材料的磁化性能.

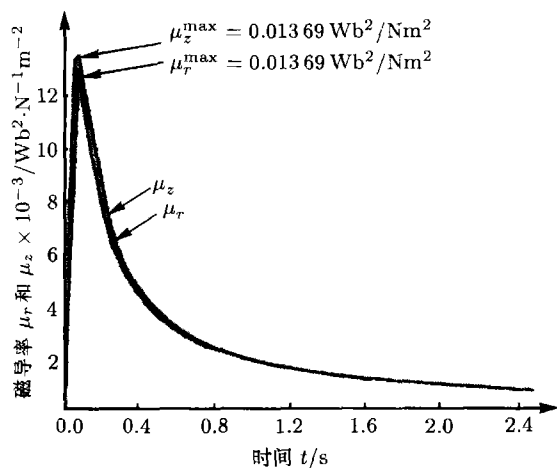


图 14 预测的 Permalloy 65 合金的轴向与径向磁导率

如前所述, 电阻率 \mathcal{R} 可由式 (27) 确定, 它等于 E_θ/J_θ , 因为相比之下 E_r 与 J_r 很小, 可忽略不计. 图 15 与图 16 的理论预测结果显示, E_θ 随时间急剧衰减, 而 J_θ 先是随时间缓慢增加, 然后是快速增加. 特别有意思的是图 17 中电阻率 \mathcal{R} 随时间的变

化, 在一个 0.4s 的时间跨度内, 电阻率 \mathcal{R} 下降了 3 个数量级, 即从 $2 \times 10^{-4} \Omega\text{m}$ 到文献 [53] 给出的试验值 $15 \Omega\text{m}$ 或 $20 \times 10^{-8} \Omega\text{m}$. 电阻的高初始值是因为初始损耗的能量大.

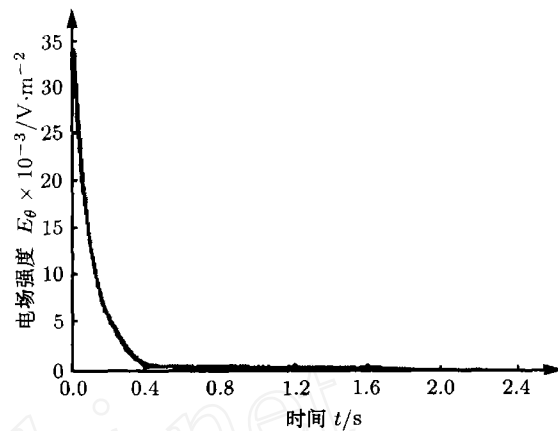


图 15 预测的 Permalloy 65 合金的整体平均电场强度随时间的变化曲线

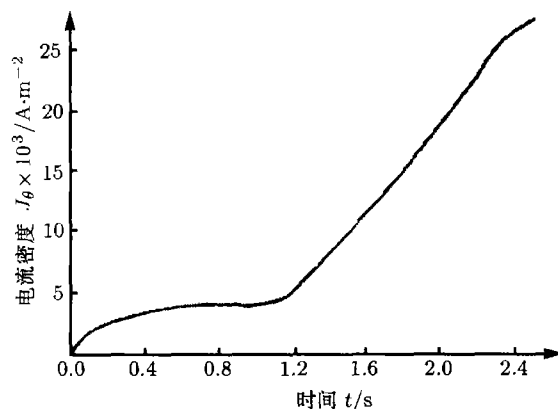


图 16 预测的 Permalloy 65 合金的整体平均电流密度随时间变化的曲线

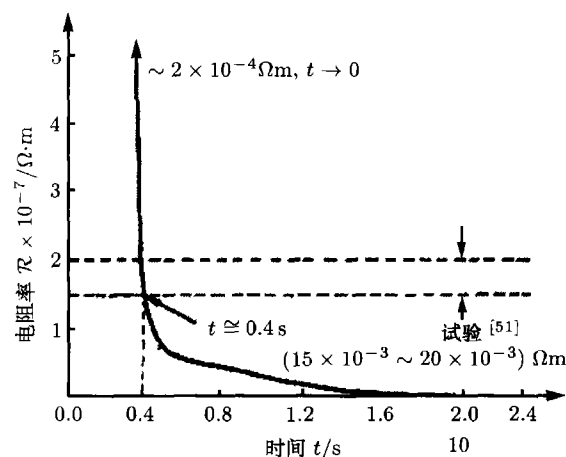


图 17 预测的 Permalloy 65 合金的电阻率随时间的变化曲线

整体耗散能密度 D 与时间的关系曲线见图 18. 在刚刚开始时, 能量损耗是在很低的水平上. 在曲线变的近乎平直以前有一小段是快速上升的, 这对应于微观的冷却, 那里温度下降到周围环境温度以下, 这一段是磁位移的可逆段, 类似于机械变形中的线弹性段. 关于这一点在这里多讨论一下. 从图 18 中可看

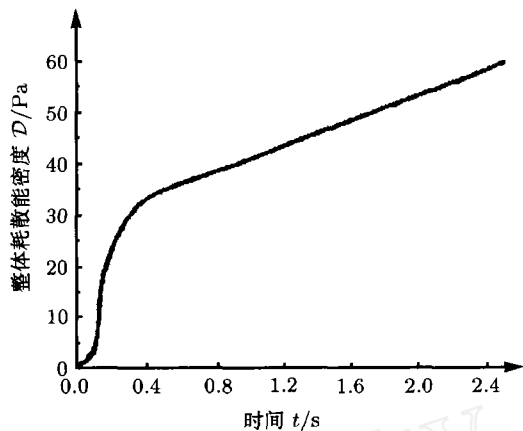


图 18 Permalloy 65 合金的整体耗散能密度

到, 在 $t \approx 0.4$ s 时 D 大约为 33.22 Pa. 对于剩下的时间段 $0.4 \sim 2.5$ s, D 额外增加了 26.52 Pa. 这表明, 大

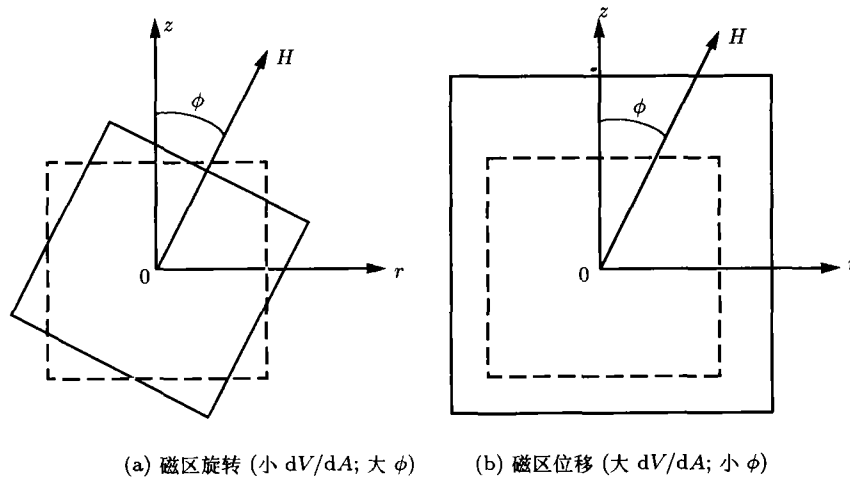
约 56% 的能量消耗发生在约占总时间 1/5 的最初的时间段内. 与文献 [53] 中给出的电阻率试验数据的总误差, 及时间因素无关. 根据图 17, 在 $t = 0.25$ s 时, $\mathcal{R} \approx 2.93 \times 10^{-6} \Omega\text{m}$, 与文献 [53] 中报告的 Permalloy 65 合金的电阻率数据相差一个数量级. 这样大的差别表明, 在进行电阻率的测量时应小心谨慎, 特别是试验数据会被发表时更要谨慎. 还应当注意, 这些数据是 μ 与 \mathcal{R} 的宏观性质. 当试件尺寸减小到微米时, B, H, μ, \mathcal{R} 等参数的性质会有显著的变化.

4.3 磁区不均匀性 (domain inhomogeneity)

非平衡热电磁学 (nonequilibrium thermoelectromagnetics) 的一个主要贡献就是, 在系统中基于 $(dV/dA, \phi)$ 定义了磁区不均匀性. 对于目前讨论的圆柱棒系统, 角度 ϕ 决定着磁场 H 的方向

$$\phi = \tan^{-1} \left| \frac{H_z}{H_r} \right| \quad (30)$$

图 19(a) 与图 19(b) 给出的是, 当沿着圆柱棒的轴向 (即 z 轴方向) 作用一个磁场以后, 单元构型从虚线构形到实线构形的变化. 磁化分为可逆部分与不可逆部分, 二部分均分别与单元的磁区位移和磁区旋转有



(a) 磁区旋转 (小 dV/dA ; 大 ϕ) (b) 磁区位移 (大 dV/dA ; 小 ϕ)

图 19 磁化的基本机理: 磁区旋转与位移

关, 如图 19(a) 与图 19(b) 所示. 特别地, 前者对应于小的 dV/dA 与大角度 ϕ , 而后者对应于大的 dV/dA 与小角度 ϕ . 于是, 就建立起一个等级系统来量化系统的不均匀程度. 在物理学教科书中讨论了 4 个磁化机理中的 3 个, 它们是可逆磁区位移、可逆磁区旋转与不可逆磁区位移. 图 20 给出了 Permalloy 65 合金的 (B_z, H_z) 曲线, 以上这 3 个区域可从这个 (B_z, H_z) 曲线图上识别出来, 如图 20 所示. 直到现在, 不可逆磁区旋转一直处于猜测之中. 根据图 21 的非平衡温度曲线可以确认不可逆磁区旋转的存在, 如果不利用

等能密度理论, 是做不到这一点的. θ 曲线最后一段的急剧下降预示着损伤的最后阶段, 从图 17 上估计, 对应的时间大约是 2.65 s, 此时 $\mathcal{R} \rightarrow 0$. 文献 [40, 41] 对于单轴拉伸与压缩试件在不同尺度下材料的损伤行为进行了详细分析. 图 21 显示的 θ 随时间振荡的特性, 暗示着材料在不同尺度下的损伤行为. 从宏观到微观, 对这种温度振荡特性进行了量化分析, 进而可以预期, 在原子水平上这种振荡更加加剧.

文献 [52] 中将磁区不均匀程度划分为 16 个等级, 归纳在表 5 中. 向上与向下的箭头分别表示与

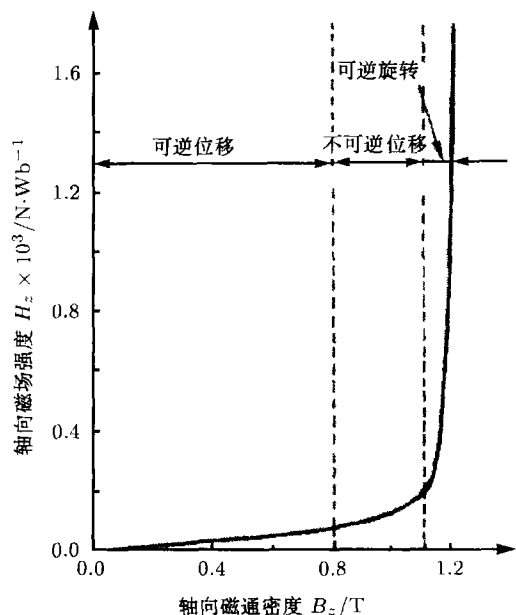


图 20 从 Permalloy 65 合金预测的磁化曲线上确定出的磁区位移与磁区旋转

向下箭头与 ϕ 的向上箭头，磁区位移则正好相反。其余的二个组合，用于混合磁区。虚线箭头也是同样的解释，除非它们表示更低的量级。实线与虚线箭头的组合表示 dV/dA 与 ϕ 的量级组合。文献 [52] 中对 Permalloy 65 合金的 $(dV/dA, \phi)$ 数值进行了计算，还应该进行试验观测以检验磁化不均匀性的量化分析结果。

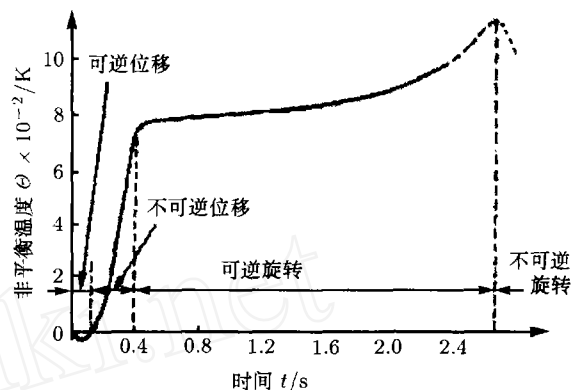


图 21 从 Permalloy 65 合金的非平衡温度随时间变化的曲线上确定出的不可逆磁区旋转

它相邻的值升高和降低。磁区旋转对应于 dV/dA 的

表 5 磁区不均匀程度的分类

量级	磁区		
	旋转	混合	位移
高	$(dVdA \downarrow; \phi \uparrow)$	$(dVdA \uparrow \text{ or } \downarrow; \phi \uparrow \text{ or } \downarrow)$	$(dVdA \uparrow; \phi \downarrow)$
中	$(dVdA \downarrow \text{ or } \uparrow; \phi \uparrow \text{ or } \downarrow)$	$(dVdA \uparrow \text{ or } \downarrow; \phi \uparrow \text{ or } \downarrow)$	$(dVdA \uparrow \text{ or } \downarrow; \phi \downarrow \text{ or } \uparrow)$
低	$(dVdA \downarrow; \phi \uparrow)$	$(dVdA \uparrow \text{ or } \downarrow; \phi \uparrow \text{ or } \downarrow)$	$(dVdA \uparrow; \phi \downarrow)$

4.4 磁性饱和

磁性饱和现象，通常与 H 持续增加时 B 趋于一个有限极限的内禀感应有关，其行为如图 13 与图 20 中 Permalloy 65 合金的 (B_z, H_z) 与 (B, H) 曲线所示，图 13、图 20 中 H_z 或 H 急剧上升而 B 变化很小或没有变化。在一般文献中提供的仅仅是整体磁性饱和的信息，即试件中单元的平均性质。当然，磁性饱和不会在试件中均匀地发生，即局部的 $B-H$ 响应也许不同，当系统的物理尺寸持续减小时这一特性变的越来越显著， B 与 H 之间的线性关系不会处处成立。

由于关系式 $B = B(H)$ 要应用到高技术领域，因此仅仅了解平均性能是不够的。 B 与 H 应该作为空间与时间变量的函数，确定出它们的变化规律。对于一种给定材料，在确定 B 与 H 时应该考虑到那些影响到材料电磁性能的因素，包括

- (1) 化学成分与晶体结构;
- (2) 机械加工与热处理;

- (3) 杂质，如铁中碳的百分含量;
- (4) 内部塑性应变;
- (5) 环境温度。

图 22 ~ 图 24 给出的是能够影响磁化曲线的

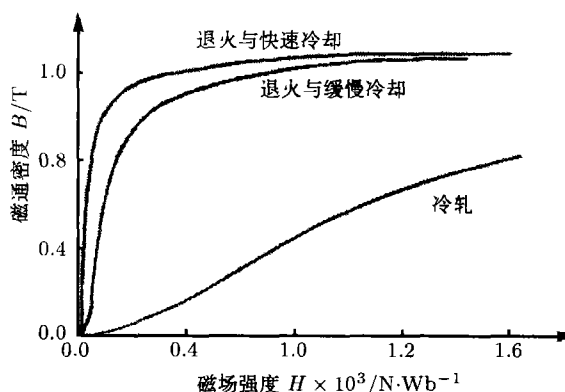


图 22 加工与热处理对 Permalloy 70 合金磁化曲线的影响 [52]

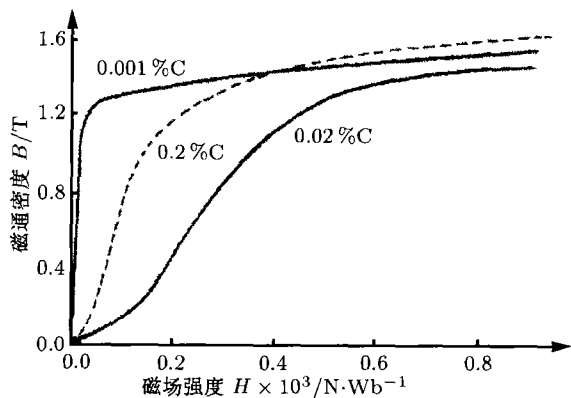


图 23 杂质含量对铁的磁化性能的影响 [52]

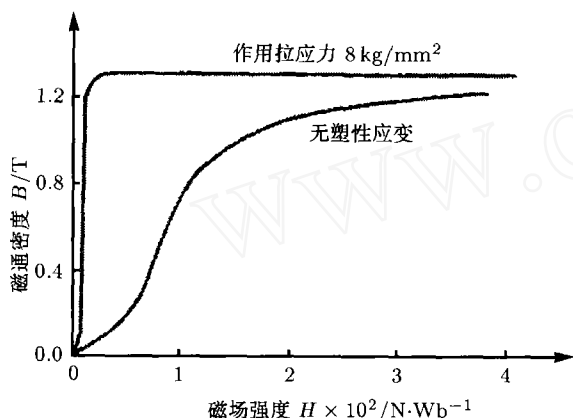


图 24 拉伸引起的塑性应变对 Peralloy 68 合金磁化曲线的影响

一些典型因素。机械加工与热处理的影响如图 22 所示,铁中碳的百分含量与内部塑性变形的影响见图 23 与图 24。由图 23,图 24 显示,退火,材料中碳含量减少及塑性应变均会削尖磁通量密度曲线的“膝盖”。这些因素对材料电磁性能的影响是显著的,而用等能密度理论可以分析这些因素的影响。同时还应该设计更精细的试验,以测量由于试件与主线圈之间气隙间距的变化及其他因素的影响。应尽量减少不确定性,不至于使加工、热处理等因素掩盖了 (B, H) 曲线的变化规律。

5 非平衡热力学应用示例

微粒模型与连续介质模型的区别在应用中并不总是泾渭分明的。当采用分子动力学方法时,原子有一定的形状与尺寸这种想法也不是不可接受的。在分析位错的运动时,将原子处理成等间距排列的点,也许有道理,也许没有道理。要了解原子的排列如何影响到宏观材料的性能,就需要掌握关于原子的更详细特性。由高分辨率电子显微镜观测到的原子的圆形外

观,也许仅仅是表示亚原子微粒的平均运动,不必都具有相同的尺寸。在一个更精密的尺度下,连续介质模型也许可以更好地描述这些微粒。即使真相永远不被了解,仍有必要去发展一个能成功地描述自然界众多现象的理论模型。要强调的是,针对分别存在的几类不同现象与其中的多种影响因素,有可能反映在同一个理论模型中。换句话说,使同一个理论适用于描述几种不同的效应,这不是那么容易能做到的,除非它具有足够的一般性,而不论是采用微粒模型,还是连续介质模型,还有二者的混合模型。科学假设的推测特性是无法避免的。

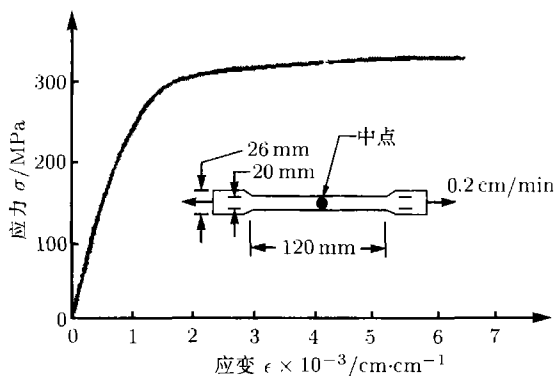
下文中,等能密度理论将用于描述多种物理过程,这些物理过程具有非平衡与非均匀特性。要分析非平衡问题,体积与表面积之比 dV/dA 的变化率必须为有限值。物理量 dV/dA 反映了布朗运动的存在,那里热效应是与力学效应是耦合的。

5.1 降温与升温

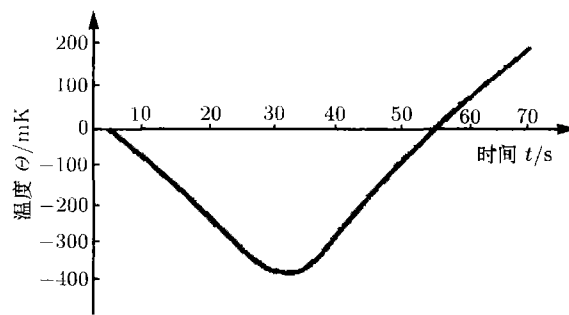
当一个普通的狭长片状试件在一个开放系统中做单轴拉伸时,试件内的温度分布是不均匀的,在一定时间内其温度低于环境温度,这与教科书中讲述的通常观念是相反的。图 25(a) 与图 25(b) 中的数据展示了 SAFC-40R 钢试件的这一非平衡行为 [36]。在试件的端部施加 0.2 cm/min 的荷载。图 25(a) 给出应力-应变曲线,图 25(b) 给出相应的温度时间历程。应力-应变曲线上一个引人注意的区域就是大约 2/3 的时间内(约 55 s)试件温度低于环境温度。在断裂前,试件的温度快速上升,这发生在应力-应变曲线的最后一段上。 (σ, ϵ) 曲线的主要部分经历一个非平衡过程,它与加载速率有关。

图 26 给出 6061-T6 铝试件的温度-时间变化曲线,试件尺寸见图 25(a)。施加的荷载比前一种情况低一个数量级。如图所示,当加载速率降低时,试件温度返回到环境温度所花的时间从 25 s 增加到 195 s,大约相差 2.83 min,水槽状的温度曲线的深度变浅。以上效应十分明显,使我们了解到,当加载速率变慢时,曲线变平,趋向于水平轴,此时接近于绝热过程;快速加载使曲线变的竖起,并趋向于垂直坐标轴。一般来说,单轴应力-应变关系具有非平衡特性。

非平衡温度曲线的波动也能为材料相变提供某种信息 1020 钢的拉伸试件在 0.508 cm/min 的加载速率下,在其所含裂纹的尖端附近探测到这种温度波动 [35],试验结果如图 27 所示。图 28 给出 \mathcal{H} -函数随时间的变化曲线,局部温度波动可通过曲线曲率的变化来识别。在等能密度理论 [15] 中 \mathcal{H} -函数的定义类似于古典热力学中的熵,但前者是用于非平衡过程(开放系统),而后者是用于平衡过程(闭合系统)。另



(a) 中点的应力 - 应变



(b) 中点的温度

图 25 SAFC-40R 钢条在拉伸时试件中点的应力 - 应变与温度 [34]

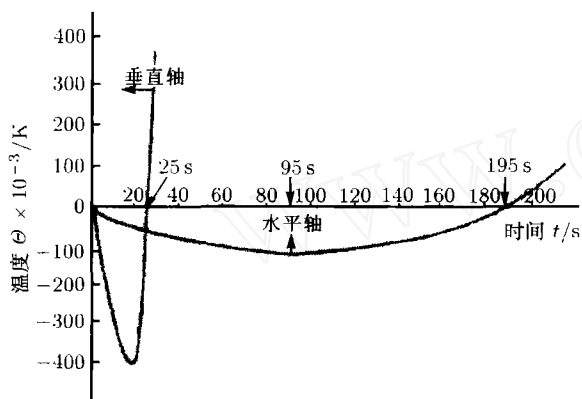


图 26 6061-T6 铝条在拉伸时加载速率的影响 [35]

外, \mathcal{H} 可以为负 (有序), 亦可以为正 (无序)

$$d\mathcal{H} = -\frac{dD}{\theta} \quad (31)$$

上式中的负号表示对系统做功. \mathcal{H} 随时间 t 的变化曲线见图 28 [35], $\mathcal{H}_1(t_1)$ 的局部波动对应于大约距裂纹尖端 0.1 cm 的一个小区域. 从 $t_1 = 42$ s 开始的 (\mathcal{H}_1, t_1) 曲线中温度升高的部分

$$\mathcal{H}_1 = 150.11 \log\left(\frac{t_1}{42}\right) \quad (32)$$

式中

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 + 0.538 \text{ MPa/K} \quad (33)$$

曲线上对应于温度升高的主要部分是

$$\mathcal{H} = 820.3 \log\left(\frac{t}{129.6}\right) \quad (34)$$

在时刻 $t = 129.6$ s, 热传递发生了逆转, 这表明随着材料逐步损伤, 开裂的试件开始向周围环境释放热量. 第二个温度降发生在 $\mathcal{H} = 0.538 \text{ MPa/K}$ 与 $t = 178.8$ s 的地方, 这可以解释为对 (\mathcal{H}_1, t_1) 系统有序与无序的重新评估. 这种重新评估对应于材料

微结构的相变, 这种相变确实可以在裂纹尖端附近的开裂表面上观测到 [35].

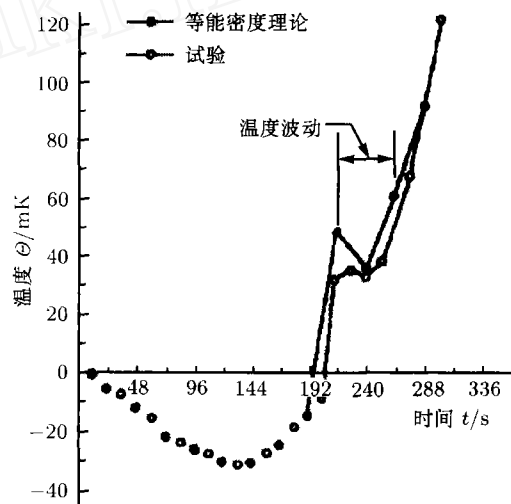


图 27 1020 钢拉伸试件裂纹前端的次级温度波动

不同尺度下免损伤区 (damage free zone) 的概念来源于美国橡树山国家实验室 (Oak ridge national laboratory) 的微观研究工作 [13], 研究发现位错发射在离裂纹尖端很小但是有限的一个距离上停止下来, 这一距离已超出了观测位错所需的分辨率. 因此, “免损伤”(damage free) 的内涵涉及到尺度效应, 如宏观损伤或微观损伤. 对于同样的 1020 钢拉伸试件 [35], 得到了耗散能密度函数 D 随时间变化的曲线, 如图 29 所示. 在一个半径为 4.75×10^{-2} cm 的局部区域内, 在 $t = 80 \sim 180$ s 的时间内, 在宏观尺度下没有探测到能量的耗散. 这可以解释为没有损伤发生, 因此这一区域被描述为宏观免损伤区, 见图 29. 重复文献 [35] 中的分析, 显示在原子和微观尺度下也有类似的特性, 见图 30. 免位错区 (dislocation free zone) 在 3 种尺度下对应的直线距离分别为 10^{-8} cm,

10^{-4} cm 与 10^{-2} cm. 实际上这些区域是观测的极限尺度.

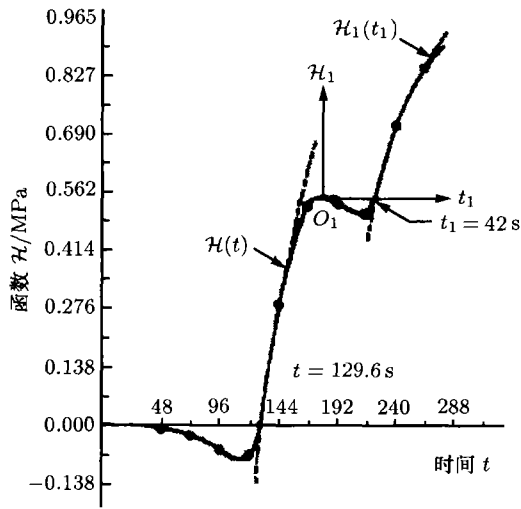


图 28 拉伸试件中裂纹前端的 \mathcal{H} - 函数的时间历程 [33]

2024-T3 铝棒, 在位移荷载 2.12×10^{-2} mm/s 作用下的单轴拉伸与压缩, 对其温度 $\theta(t)$ 随时间的变化进行了更全面的解释 [40,41]. 图 31 是单轴拉伸的情况, 显示了不同尺度下尺寸与时间 t 的相互作用.

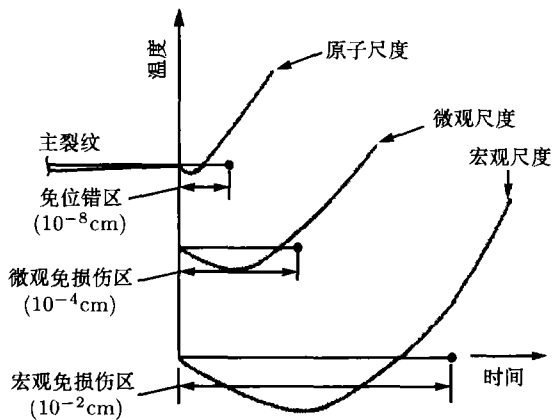


图 30 表观免损伤区的尺度效应: 冷却 / 加热 (cooling/heating)

5.2 高速冲击

当一个钨弹头以 9000 m/s 的高速击中一个铝靶时, 弹头与铝靶二者均发生严重的损伤, 表现为破碎、开裂, 还有材料微结构的相变, 在那里材料会转变为不均匀的液体或气体. 在纳米尺度下, 对这一非平衡损伤状态进行了分析, 钨弹头宽 1.4 cm, 长 5 cm, 5083 铝板厚 2 cm, 宽 12 cm, 详见文献 [42].

在大约 (10 ~ 15) ns 的时间内靶板上的局部应

降温与升温随着尺寸与时间的变化而交替变化. 根据式 (1) 给出的 $d\theta/\theta$ 与 dV/dA 的关系, 降温与升温还与材料单元的体积膨胀和变形有关 [55].

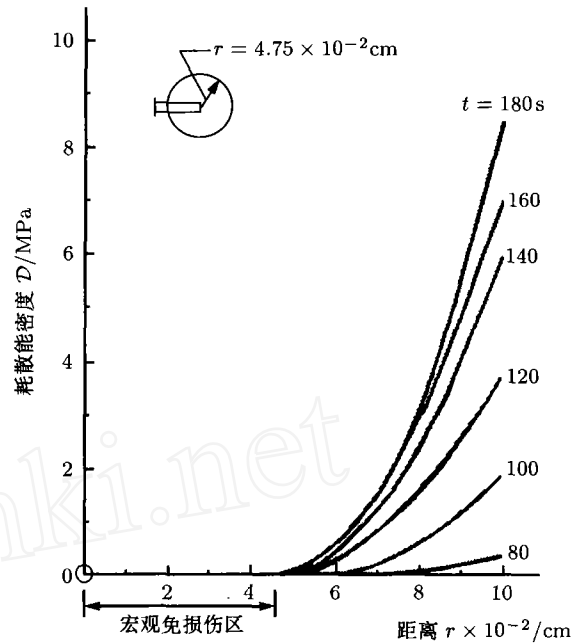


图 29 在 0.508 cm/min 加载速率下, 预估的 1020 钢拉伸试件的宏观免损伤区

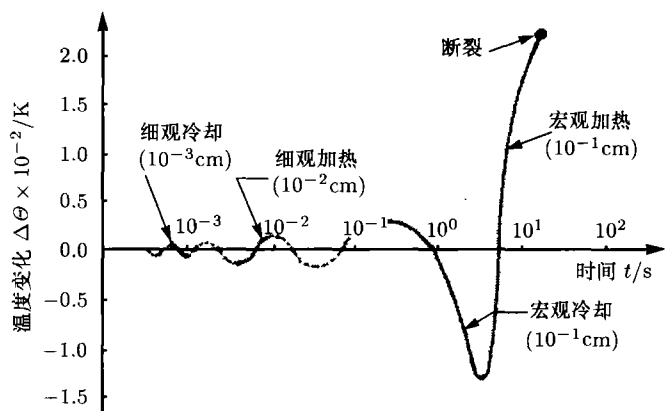


图 31 2024-T3 铝棒拉伸时宏观与细观尺度下的温度 - 时间曲线

变率, 对于固体相是增加到 10^4 s^{-1} , 对于液体相是增加到 10^5 s^{-1} . 图 32 显示, 在时刻 $t \approx 10$ ns, 弹头与靶板的损伤局限在边角区域, 一个固体碎片以 70° 角和 74.09 m/s 的速度从靶板上脱落下来. 更精确的分析显示, 在接触时已形成液体层, 见图 33. 据计算, 液体层出现的时间约为 $t \approx 4$ ns, 此时 $(dD/de)_m = 25.71 \text{ MPa}$, 这个值超出了铝从固态到液态的相变临界值 22.3 MPa, 钨的临界值是 96 MPa. 量

dD/de 与古典热力学中用于确定从固态到液态和气态的相变的潜热 (latent heat) 相对应, 但 dD/de 是用于局部的瞬变状态. 仅当 $D \rightarrow Q$ 时, 有

$$\frac{dD}{de} \rightarrow \frac{dQ}{dV} = T \frac{dS}{dV} \quad (35)$$

式 (35) 中, dQ 是温度增加 dT 时每单位质量所需的热量, dV 是体积的改变, 相应的熵的变化为 dS . 一个小的时间段 dt 是形成液体层所花费的时间, 那里将发生滑动.

在 $t \approx 15$ ns, 在弹头 / 靶板接触处附近的局部压力与温度非常高, 以至于两个小的液体区域, 大小分别为 $0.072 \text{ mm} \times 0.191 \text{ mm}$ 与 $0.143 \text{ mm} \times 0.358 \text{ mm}$, 转变为气体, 这两个区域在图 34 中用两个实心的圆点来表示. 对每一时间步, 即使时间间隔非常小, 也可以计算出材料的损伤状态. 到了时刻 $t = 280$ ns, 图 34 上标出的固体孤岛就转变为气体而消失. 图 35 中

法和高性能的计算机可供选用.

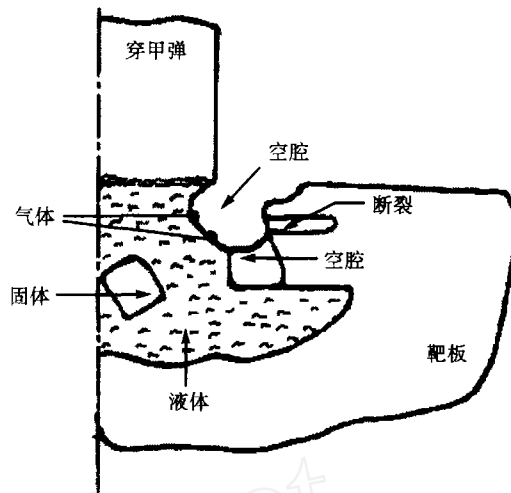


图 34 在 $t = 15$ ns 时刻的损伤情形

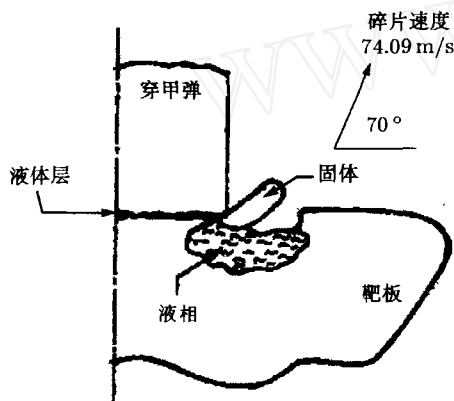


图 32 在 $t = 10$ ns 时刻的局部损伤

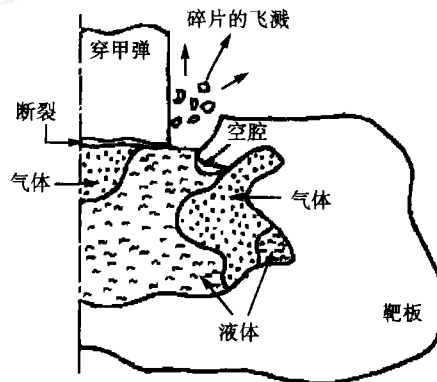


图 35 在 $t = 280$ ns 时刻弹头 / 靶板的高速冲击损伤

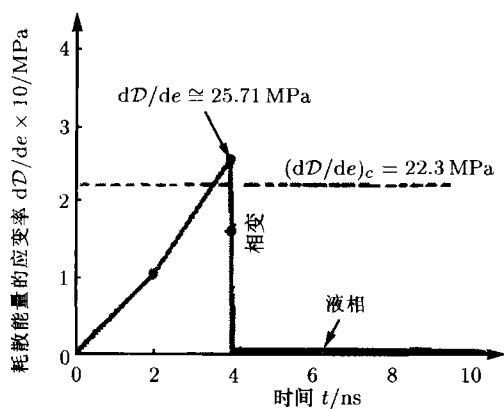


图 33 冲击下耗散能量对应变的变化率作为时间的函数

标为气体的两个大的区域, 是由于液体蒸发而形成的. 弹头并没有断裂, 继续有碎片脱落. 继续分析显示, 液体因为受到弹头的压缩而呈圆盘状扩散. 靶板上因相当大的变形而形成一个弹坑. 目前大规模的数值模拟计算是不成问题的, 因为有高效率的数值算

5.3 电磁发射器

电磁轨道枪 (rail gun) 与磁悬浮交通工具放出高强度能量, 大部分都做了无用功. 如果不是超导技术的发展, 许多高能释放技术都不切实际, 因为效率太低. 能量耗散特性的控制成为一个主要的设计因素. 文献 [58] 中对一个典型的 70 kJ 的轨道枪系统 [56] 进行了研究, 对式 (1) 中的耗散能密度 D 进行了计算. 这样一来, 轨道枪系统中的非平衡温度波动可被计算出来, 并与实验结果进行对比.

轨道枪的主要设计目标是将子弹加速到 (12 ~ 15) km/s, 要求在极短时间内实现很高能量的储存和释放. 可以采用磁通量压缩电流发生器 (magnetic flux compression current generator, MFCG) 来实现这一要求, 它具有一个可在 40 ms 时间内在 20 kV 电压下提供 600 kJ 能量的电容器组. 轨道枪的电流 I 作为时间 t 的函数, 图 36 中给出由一组试验数据拟合出的曲线. 爆炸的时间与相应的电流分别是

50 μs 与 2×10^5 A, 放电的时间与相应的电流分别是 3.56×10^{-4} s 与 5.75×10^5 A. 子弹的位移和速度可用 X- 射线影像法进行测量.

利用文献 [57, 58] 中给出的轨道上等价电流 I_{eq} 与等价电阻 R_{eq} 的数据, 传送给轨道的能量可由下式计算

$$U = \int_0^t R_{\text{eq}} I_{\text{eq}}^2 dt \quad (36)$$

每一轨道的体积为 $0.9 \text{ m} \times 0.019 \text{ m} \times 0.019 \text{ m}$, 式 (36) 中的 U 除以轨道的体积, 就得出了式 (2) 中的体积能量密度 dW/dV . 图 37 给出 dW/dV 随时间增加的关系曲线, 在终点时刻 $t = 800 \mu\text{s}$, 能量达到 30 MN/m^2 (或 MPa) 的水平. 此外, 磁场强度 H 随时间的变化由下式确定

$$H = \frac{I}{\Delta y} \quad (37)$$

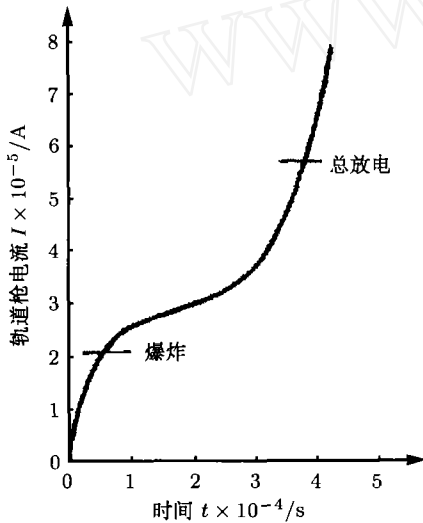


图 36 轨道枪 (70 kJ 电容器组) 中电流与时间关系的试验数据

式中 I 是轨道枪中的电流, $\Delta y = 12.5 \times 10^{-3} \text{ m}$, 是轨道间距. 利用图 36 的数据, 可由式 (37) 确定出 H 随时间的变化. 图 37 与图 38 的结果相结合, 可以得到 dW/dV 与磁场强度 H 的函数关系, 结果如图 39 所示. 一旦 dW/dV 与 H 已知, 磁通量密度 B 为

$$\frac{dW}{dV} = \int H dB \quad (38)$$

式 (38) 实质上就是式 (22), 而在式 (22) 中的 h 与 b 分别为等能密度数学空间中的磁场强度与磁通量密度. 由此可得出一个典型的轨道枪系统中的 (B, H) 变化曲线, 如图 40 所示. 在爆炸时刻 $t = 5 \text{ ms}$, (B, H) 曲线的斜率显著增加, 此时 $B = 0.4 \text{ T}$, $H = 20 \text{ MN/Wb}$.

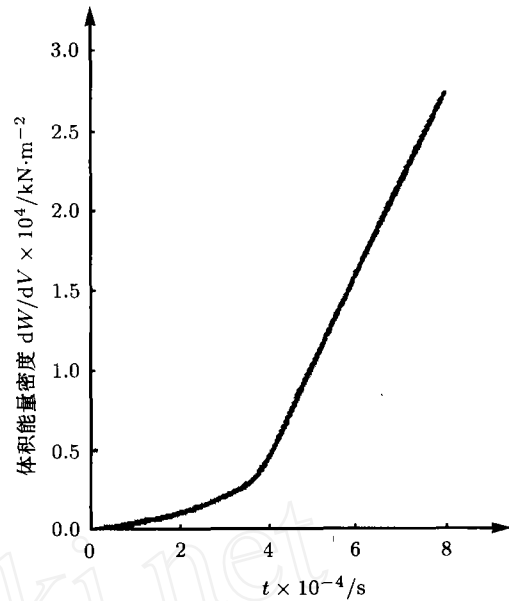


图 37 70 kJ 电容器组系统中体积能密度随时间的变化

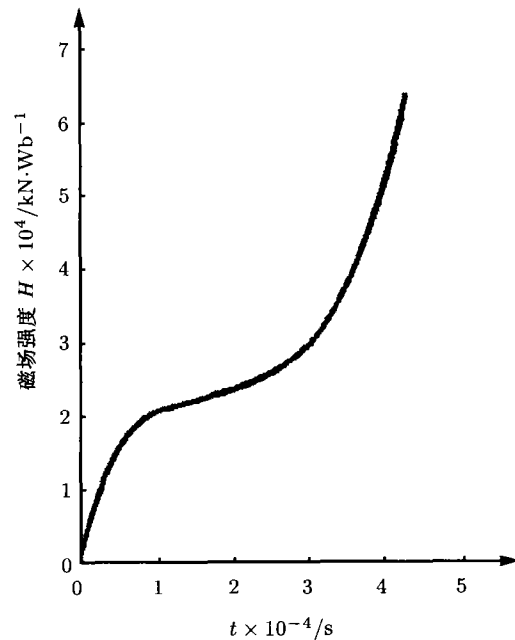


图 38 磁场强度随时间的变化 (70 kJ 电容器组)

已知子弹的加速度与质量 (2.9 g), 可以确定出对子弹所做的功与时间 t 的函数关系. 结果见图 41, 曲线稳定在 10 kJ 的水平上作为有用功. 而输入的能量为 70 kJ , 效率仅为 14.29% . 这表明, 大部分能量被轨道枪的部件吸收, 在开火以后造成轨道枪的严重损伤. 基于效率为 15% , 可以由图 37 确定出耗散能密度 $D(t)$, 结果见图 42. 对于机械系统, 式 (1) 的等价形式为

$$\frac{d\theta}{\theta} = -\frac{d\sigma\epsilon}{dD} \quad (39)$$

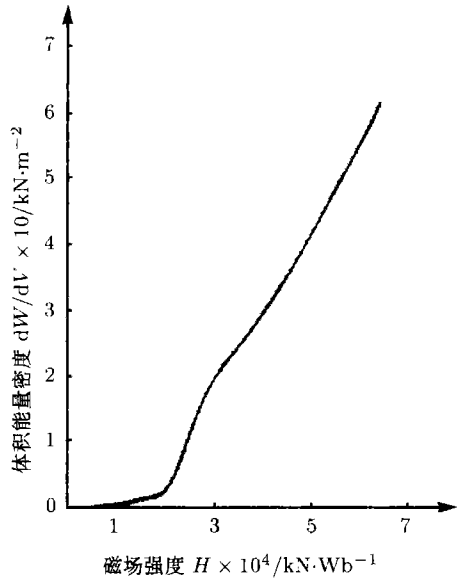


图 39 70 kJ 电容器组的轨道枪系统中体积能密度随磁场强度的变化

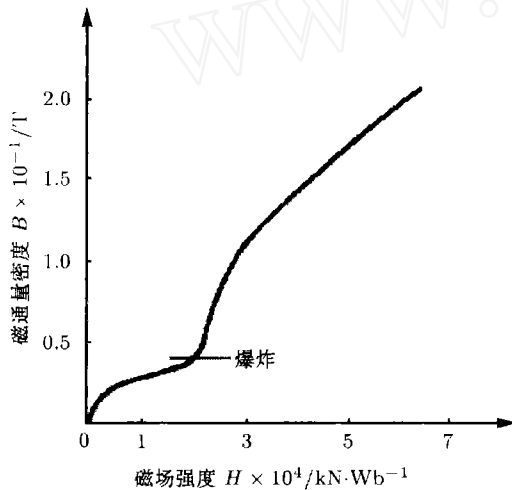


图 40 70 kJ 电容器组的轨道枪系统中磁通量密度与磁场强度的关系

式 (39) 中, 诱导应力 σ 与诱导应变 ϵ 是时间 t 的已知函数^[58], 于是温度 θ 可由式 (39) 求出. 图 43 显示, 在最初的 2.5×10^{-5} s 时间内, 温度急剧上升到一个极高的水平, 对应的时间就是爆炸发生的时间. 温度在这个最初阶段的急剧上升以后, 就快速下降, 峰值约为 2370 K. 达到峰值的时间 $t \approx 2.5 \times 10^{-5}$ s, 这一温度已超出铜 1355 K 的熔化温度. 但由于温度下降非常快, 轨道来不及熔化. 然而, 会产生局部损伤. 有趣的是, 在时刻 $t = 12.5 \mu\text{s}$, 图 43 中有一小段温度降到环境温度以下. 这一降温行为与在单轴拉伸试件中观测到的行为相类似. 经过 50×10^{-5} s 时间后, 温度下降到 744 K, 轨道仍然非常热. 数据显示, 轨道材料应该选用耐高温材料, 至少能承受最初 $500 \mu\text{s}$ 内所产生的高温.

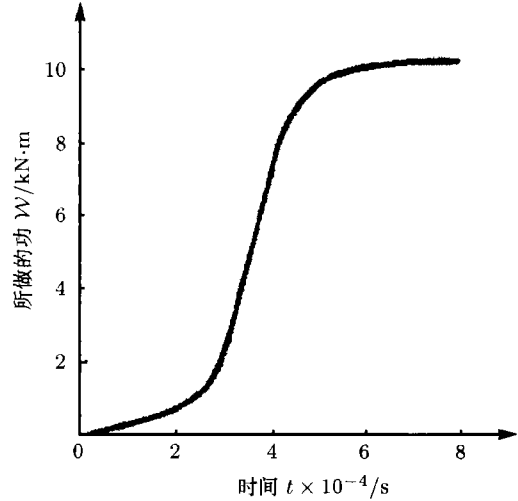


图 41 70 kJ 轨道枪系统中对子弹所做的功作为时间的函数

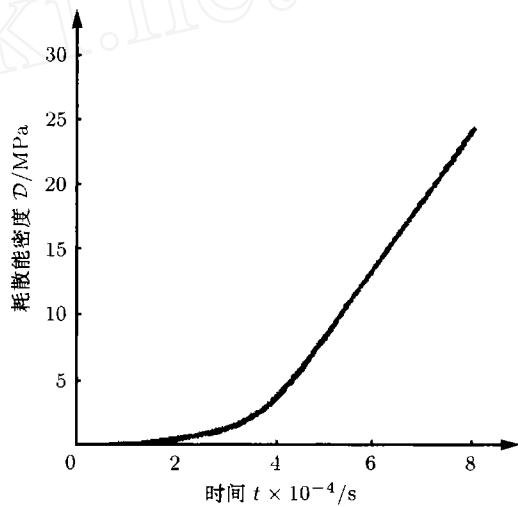


图 42 具有 15% 效率的 70 kJ 轨道枪系统耗散能密度随时间的变化

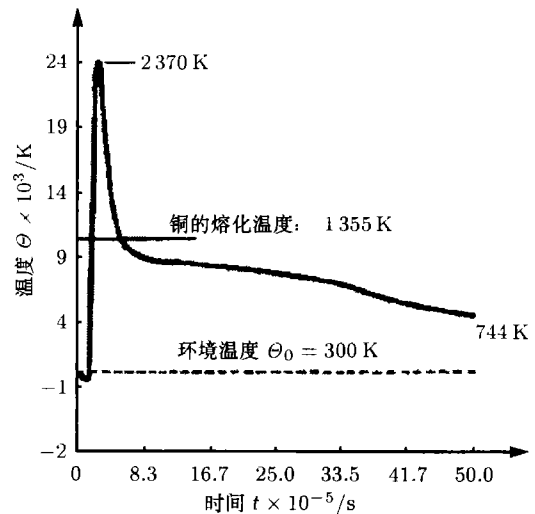


图 43 70 kJ 轨道枪系统的非平衡温度随时间的变化

6 附加评述

纳米技术曾经只是实验室里的研究兴趣,而现在很有可能引起未来的工业革命.将原子一个个地排列起来制造出具有指定用途的材料,是21世纪的科学家与技术专家的梦想.

在1989年,IBM的科学家利用扫描电镜用氩原子拼出了公司名称缩写的3个字母IBM.另一项成就同样是在IBM实验室里完成的,就是用铁原子的排列拼出了中文字原子的发音“yuan-tze”.显微观测显示这些字符是由象网球状的物体排列组成的,但实际上形状并不是真正的球形.难道原子具有一定的形状和尺寸吗?根据量子力学,一个原子不具有固定的能量,尽管据推测原子处于一种最小能量状态.这一观点,再加上不确定性原理,可以对原子的半径给出一个估计.于是创造出一个单位Ångström,距离 0.528×10^{-8} cm大约为半个Ångström,称为Bohr半径.从此,在数学上对各种各样具有不同轴线的球体的填充排列问题进行了研究,目的是确定出使接触球体留下的空洞体积为最小的那些排列方式.

6.1 原子尺度

从事物理过程原子模拟工作^[5~9]的那些研究人员,需要探查原子的详细特征,而不仅仅是接受一个点阵排列的模型,其中原子由预先假定的作用力结合在一起.这些点的等间距排列与不等间距排列会引起多大的差别?这些点是静止不动还是运动?运动的话是如何运动的?应该谨慎对待这些问题,因为这些因素的影响是显著的.对于一个特定的问题一个简单的“是”或“不是”是不够的,在某些特殊情况下,答案是多样化的.

原子模型可以用能量来描述,尽管一个受激原子没有由振动频率定义的确定的能量.如果是这样,为简便起见,可假定原子与电磁场的相互作用会释放出能量.于是,原子可选定一个较低的能量状态,而电磁场会导致原子处于一个较高的受激状态.在原子从较高能量状态变为较低能量状态之前和之后,系统的总能量保持不变.可以想象,给每一个原子赋予一个可变的能量,高能状态、基态与低能状态,取决于电磁场与它周围的原子,可用概率方法确定.原子核也同样存在于不同的能量水平下.

6.2 宇宙尺度

饶有兴趣的是,自然界的均匀性与各向同性性质在天体物理学中也一直引起广泛的关注.由于空间尺度的放大,观测上倾向于采用连续介质模型.但同样存在微粒模型与连续介质模型之间的一致性.早在20世纪30年代初,从多普勒红移谱上探测到银河

系以外星云的回退速度(recession velocity).Hubble估算出这些速度具有数千米每秒(km/s)的量级,在百万秒差距(megaparsecs, $1 \text{ Mpc} = 3.08 \times 10^{19}$ km)的尺度上直接与距离成正比.宇宙在3000 Mpc的大尺度上呈现出均匀性与各向同性性质.当尺度缩减到100 Mpc时,宇宙则是非常不均匀的,由恒星、星系和星系团组成.这里再一次,均匀性或不均匀性的定义依赖于当时最大光学仪器的分辨率.最近从太空上的Hubble望远镜获得的数据显示,以十亿光年为量级,那么现在估算出的宇宙的起源至少要相差1个数量级.在本文讨论中,可以说,有利于在非常大的尺度下宇宙具有均匀性的经验证据是相当强的.至少,今天的宇宙学家赞同采用连续介质方法来研究宇宙.

6.3 普遍特性

天体物理学中质量消失的问题也说明在宇宙中很多事件可以用基本粒子理论来预测.相信所有的物理真实服从于同一套规律.借助于陆地实验与天文学观测获得的数据也许可能发现这些规律.已经提出了许多时空模型,与等能密度理论^[15]相似,时间以隐含形式与空间尺寸相耦合.等能密度空间与能量变化着的物理空间相交织,在3个方向上随时间发生着膨胀和收缩.用经典理论的术语就是,空间的度量尺度在3个方向上是不同的,依赖于能量变化导致的局部主导位移,它们与表4中的4个基本力场有关.等能密度理论中的度量尺度与 x, y, z 坐标系相类似,那里每一个坐标轴可以发生不同程度的膨胀或收缩,好像那些尺度是刻在一张橡皮板上一样.如果橡皮板在3个方向上发生不同程度的拉伸,其上的刻度也随之膨胀或收缩.这一特性是局部不均匀性所致,反映在许多非平衡热力学问题之中,可参见文献[14].

值得一提的是, $\Delta T/T$ 已用在天体物理学上,作为宇宙微波背景辐射均匀性与各向同性的度量,那里 $\Delta T/T < 10^{-3}$,据报道宇宙背景辐射有一个极限.让我们回顾一下,对于所分析的受载固体的温度变化,式(1)中的 $d\theta/\theta$ 与式(9)中的 $\Delta T/T$ 分别对应于非平衡过程与平衡过程.特别地,式(1)中的 $d\theta/\theta$ 直接与 dV/dA 有关,已被用于分析Permalloy 65合金磁化过程中的不均匀性.没有理由认为 dV/dA 不能用于研究宇宙尺度下的问题.另一个被称为“热裂化(thermal cracking)”或高温分解(pyrolysis)的领域,在裂化炉中已发现体积与表面积之比这一效应非常显著.术语“热裂化”的定义是热分解加高温下碳氢化合物分子的某种重新排列,这一技术涉及到丙烯、丁二烯、芳香化合物与氢等产品的生产.这里面包含大量的热传递,因为高温分解反应要吸收很多

热量。在实验室里,对于具有低的体积-面积比的熔炉,早已证实了表面效应的重要性。具有很大的体积-面积比的情况,这些效应的重要性在商业大公司中也已得到证实。最近积累起来的信息已经表明,体积-表面效应的重要性远远超出了原先的预期。

6.4 结束语

科学的进步也许不能没有微粒与连续介质这种双重的概念。自然界的真相也许无法借助于科学手段了解到。关键是对自然界行为的一致性描述,并且希望所取得的成果能服务于人类。

参 考 文 献

- 1 Chediak M, Reciuto R, McKay N. Nanotech. Grows. Red Herring 99, 2001. 47~58
- 2 Griffith A A. The phenomena of rupture and flow in solids. *Philos Trans Roy Soc London, Series A*, 1921, 221: 163~198
- 3 Cheng K J, Cheng S Y. Boundary conditions of electrons at interface, Part I: Mixture of nanometer crystals and amorphous silicon. *J Theoret Appl Fract Mech*, 2001, 37: 11~17
- 4 Cheng K J, Cheng S Y. Boundary conditions of electrons at interface, Part II: Internal stress in thin films. *J Theoret Appl Fract Mech*, 2001, 37: 19~27
- 5 Adams J B, Rockett A, Kieffer J, et al. Atomic-level computer simulation. *J Nucl Mater*, 1994, 216: 265~274
- 6 Proceedings of the Eurio Fermi Summer School on Molecular Dynamics Simulation of Statistical Mechanics Systems. Vienna, 1985
- 7 Monte Carlo Methods in Statistical Physics. 2nd ed. Berlin: Springer, 1984
- 8 Horstemeyer M F, Baskes M I. Atomistic finite deformation simulations: a discussion on length scale effects in relation to mechanical stresses. *J Eng Mater Technol*, 1999, 121: 114~119
- 9 Horstemeyer M F, Baskes M I, Plimpton S T. Atomistic simulation of size scales and strain rate effects on plasticity. *J Metals* (in press)
- 10 Sih G C, Tzou D Y. Heating preceded by cooling ahead of crack: macrodamage free zone. *J Theoret Appl Fract Mech*, 1986, 6(2): 103~111
- 11 Sih G C. Thermal/mechanical Interaction Associated with the Micromechanics of Material Behavior. Technical Report, Institute of Fracture and Solid Mechanics, Lehigh University, 1987
- 12 Tzou D Y, Sih G C. Thermal/mechanical interaction of subcritical crack growth in tensile specimen. *J Theoret Appl Fract Mech*, 1988, 10(1): 59~72
- 13 Ohr S M. An electron microscope study of crack tips deformation and its impact on the dislocation tiny of fracture. *Mater Sci Eng*, 1985, 72: 1~35
- 14 Sih G C. In: Sienietyez S, Salamon P, eds. Some Basic Problems in Nonequilibrium Thermomechanics. New York: Taylor & Francis, 1992. 218~247
- 15 Sih G C. Thermomechanics of solids: nonequilibrium and irreversibility. *J Theoret Appl Fract Mech*, 1988, 9(3): 175~198
- 16 Sih G C. Experimental fracture mechanics: strain energy density criterion. In: Mech Fract, vols. VII, XVII-LVI. The Netherlands: Martinus Nijhoff, 1981
- 17 Sih G C. Micromechanics associated with thermal/mechanical interaction for polycrystals. In: Sih G C, ed. Mesomechanics 2000: Role of Mechanics for Development of Science and Technology, vol. 1. Beijing: Tsinghua University Press, 2000. 143~152
- 18 Sih G C. Strain energy density factor applied to mixed mode crack problems. *Int J Fract Mech*, 1974, 10: 85~106
- 19 Kipp M Z, Sih G C. The strain energy density failure criterion applied to notch elastic solids. *Int J Solids Struct*, 1975, 11: 153~173
- 20 Noguchi H, Furuya Y. A method of seamlessly combining a crack tip molecular dynamics enclave with a linear elastic outer domain in simulating elastic-plastic crack advance. *Int J Fract*, 1997, 87: 309~329
- 21 Furuya Y, Nagachi H. A combined method of molecular dynamics with micromechanics improved by moving the molecular dynamics region successively in the simulation of elastic-plastic crack propagation. *Int J Fract*, 1998, 94: 17~31
- 22 Sih G C, Song Z F. Damage analysis of tetragonal perovskite structure ceramics, implicated by asymptotic field solutions and boundary conditions. *J Theoret Appl Fract Mech*, 2002, 38(1): 15~36
- 23 Sih G C, Liu B. Mesofracture mechanics: a necessary link. *J Theoret Appl Fract Mech*, 2001, 37: 37~395
- 24 Sih G C. Dynamic aspects of crack propagation. In: Kanninen M P, Adler W F, Rosenfield A R, Jaffee R I, eds. Inelastic Behavior of Solids. New York: McGraw-Hill, 1970. 607~639
- 25 Hartrant R J, Sih G C. Application of the strain energy density fracture criterion to dynamic crack problems. In: Sih G C, van Elst H C, Broek D, eds. Proceedings of Prospects of Fracture Mechanics. Leiden: Noordhoff, 1973. 449~458
- 26 Sih G C. Dynamic crack problem — strain energy density fracture theory. In: Sih G C, ed. Elastodynamic Crack Problems. Leiden: Noordhoff, 1977. 17~47
- 27 Sih G C, Chao C K. Failure initiation in unnotched specimens subjected to monotonic and cyclic loading. *J Theoret Appl Fract Mech*, 1984, 2(1): 67~74
- 28 Sih G C. A special theory of crack propagation. In: Sih G C, ed. Methods of Analysis and Solutions of Crack Problems. Leiden: Noordhoff, 1973. 21~45

- 29 Sih G C. Fracture mechanics of engineering structural components. In: Sih G C, Faria L, eds. *Fracture Mechanics Methodology*. Dordrecht: Martinus Nijhoff, 1984. 35~101 (Boston: Now Kluwer Academic Publishers)
- 30 Sih G C. *Mechanics of Fracture Initiation and Propagation*. The Netherlands: Kluwer Academic Publishers, 1991
- 31 Wang J. I-Chin. Beijing: Chinese Social Publishing Company, 1990
- 32 Mast P W, Beaytien L A, Clifford M, et al. A semi-automated in-plane loader for material testing. *J Exp Mech*, 1983, 23(2): 236~241
- 33 Mast P W, Nash G E, Michopoulos J, et al. Characterization of strain induced damage in composites based on the dissipated energy density – Part I: Basic scheme and Formulation; Part II: Composite specimens and naval structures; and Part III: General material constitutive relation. *J Theoret Appl Fract Mech*, 1995, 22(2): 71~125
- 34 Sih G C, Chou D M. Nonequilibrium thermal/mechanical response 6061 of aluminum alloy at evaluated temperature. *J Theoret Appl Fract Mech*, 1989, 12(1): 19~31
- 35 Sih G C, Tzou D Y, Michopoulos J G. Secondary temperature fluctuation in cracked 1020 steel specimen loaded monotonically. *J Theoret Appl Fract Mech*, 1987, 7(2): 79~89
- 36 Sih G C, Tzou D Y. Irreversibility and damage of SAFC-40R steel specimen in uniaxial tension. *J Theoret Appl Fract Mech*, 1987, 7(1): 23~30
- 37 Sih G C, Lieu F L, Chao C K. Thermal/mechanical damage of 6061-T6 aluminum tensile specimen. *J Theoret Appl Fract Mech*, 1987, 7(2): 67~78
- 38 Sih G C, Song D H. Time dependent damage in half plane — Part I: displacement loading. *J Theoret Appl Fract Mech*, 1988, 9(3): 199~215
- 39 Sih G C, Song D H. Time dependent damage in half plane — Part II: traction loading. *J Theoret Appl Fract Mech*, 1988, 9(3): 199~215
- 40 Sih G C, Chao C K. Scaling of size/time/temperature associated with damage of uniaxial specimens — Part I: Progressive damage in uniaxial tensile specimen. *J Theoret Appl Fract Mech*, 1989, 12(2): 93~108
- 41 Sih G C, Chao C K. Scaling of size/time/temperature associated with damage of uniaxial specimens — Part II: Progressive damage in uniaxial compressive specimen. *J Theoret Appl Fract Mech*, 1989, 12(2): 109~119
- 42 Sih G C. Initial damage states of hypervelocity impact for tungsten projectile. *J. Theoret Appl Fract Mech*, 1990, 13: 167~180
- 43 Holian B L, Zhou S J, Lomdahl P S, et al. Molecular-dynamics simulation of fracture: an overview of system size and other effects. *Mater Res Soc Symp Proc*, 1996, 409: 3~9
- 44 Yu Sklyadneva, Rusina G G, Chulkov E V. Vibrational states in vicinal surfaces of Al, Ag, Cu, Pd. *J Surf Sci*, 1998, 416: 17~36
- 45 Yu Sklyadneva, Rusina G G, Chulkov E V. Vibrations on Cu surface covered with Ni monolayer. *J Surf Sci*, 1999, 435: 517~519
- 46 Thompson Sir W. In: *Mathematical and Physical Papers*, vol. 3. London: Cambridge University Press, 1890, 63~82; Thompson Sir W. On thermo-elastic and thermo-magnetic properties of matter. *Quarterly J Math*, 1857: 1: 57~77
- 47 Sih G C. The role of surface and volume energy in the mechanisms of fracture. In: Balakrishnan, Bottani C E, eds. *Mechanical Properties and Behavior of Solids: Plastic Instability*. Singapore: World Scientific, 1985. 396~461
- 48 Sih G C. Strain energy density and surface layer energy for blunt cracks or notches. In: Sih G C, ed. *Stress Analysis of Notch Problem*. Leiden: Noordhoff, 1978. 13~110
- 49 Nadai P M. *Untersuchungen der festigkeitslehre mit hilfe von temperature-messungen: [dissertation]*. Berlin: Technische Hochschule, 1911
- 50 Sih G C. Reconciliation of surface and volume energy density in continuum mechanics. In: Yu M H, Fan S C, eds. *Strength Theory*. Beijing: Science Press, 1998. 67~78
- 51 Sih G C. Thermal/mechanical penetration damage of 4340 steel impacted by tungsten projectile. *ASME Appl Mech Div*, 1993, 171: 133~145
- 52 Lee Y D. Nonequilibrium thermoelectromagnetic response in ferromagnetic solids: [dissertation]. Bethlehem, Lehigh University, PA, USA, 1993
- 53 Horger O. *ASME Handbook on Metals Engineering Design*. Second ed, 1965
- 54 Bozorth R M. *Ferromagnetism*. New York: D V Nostrand Company Inc, 1951
- 55 Sih G C. *Thermal/mechanical Interaction Associated with the Micromechanics of Material Behavior*. Lehigh University Institute of Fracture and Solid Mechanics Publication, 1987
- 56 Hawke R S, Brooks A L, Deadrick F J, Scudder J K. Results of railgun experiments power by magnetic flux compression generators. *IEEE Trans Mag*, 1981, Mag-18
- 57 Deadrick F J, Hawke R S, Scudder J K. Magrac. A railgun simulation program. In: *Conference on Electromagnetic Guns and Launchers*, 1980
- 58 Sih G C. Design and development of electromagnetic launcher device. Technical Report, Institute of Fracture and Solid Mechanics, Lehigh University, Bethlehem, PA, 1993
- 59 Crymes B L, Albright L F. Cracking, Thermal, *Encyclopedia of Physical Science and Technology*, vol. 3. New York: Academic Press, 1987. 768~785

IMPLICATION OF SCALING HIERARCHY ASSOCIATED WITH NONEQUILIBRIUM: FIELD AND PARTICULATE

George C Sih

Department of Mechanical Engineering and Mechanics, Lehigh University, Bethlehem, PA 18015, USA

Institute of Mechanics, Chinese Academy of Science, Beijing 100080, China

School of Mechanical Engineering, East China University of Science and Technology, Shanghai 200237, China

Abstract The advent of nanotechnology has necessitated a better understanding of how the material microstructure changes at the atomic level would affect the macroscopic properties that control the performance. Such a challenge has uncovered many phenomena that were not previously understood and taken for granted. Among them are the basic foundation of dislocation theories which are now known to be inadequate. Simplifying assumptions invoked at the macroscale may not be applicable at micro- and/or nanoscale. There are implications of scaling hierarchy associated with inhomogeneity and nonequilibrium of physical systems. What is taken to be homogeneous and in equilibrium at the macroscale may not be so when the physical size of the material is reduced to microns. These fundamental issues cannot be dispensed at will for the sake of convenience because they might alter the outcome of predictions. Even more unsatisfying is the lack of consistency in modeling physical systems. This could be translated to the inability for identifying the relevant manufacturing parameters and rendering the end product unpractical because of high cost. Advanced composite and ceramic materials are cases in point.

Discussed are potential pitfalls for applying models at both the atomic and continuum levels. No encouragement is made to unravel the truth of nature. Let it be particulates, a smooth continuum or combination of both. The present trend of development in scaling tends to seek different characteristic lengths of material microstructure with or without the influence of time effects. Much will be learned from atomistic simulation models to show how results could differ as boundary conditions and scales are changed. Quantum mechanics, continuum and cosmological models provide evidence that no general approach is in sight. Of immediate interest is perhaps the establishment of greater precision in terminology so as to better communicate results involving multiscale physical events.

Keywords Scaling effect, continuum field, particulate, nonequilibrium thermodynamics, isoenergy density theory, atomic simulation method