

УДК 539.3, 539.4

КОЛЕБАНИЯ ЭНЕРГИЙ В ОДНОМЕРНОМ КРИСТАЛЛЕ

© 2014 г. А. М. Кривцов

Представлено академиком Н.Ф. Морозовым 03.03.2014 г.

Поступило 07.04.2014 г.

DOI: 10.7868/S0869565214270097

В последние десятилетия методы механики дискретных сред интенсивно применяются для описания неравновесных процессов в веществе [1–3]. Особенно возрос интерес к дискретным подходам в связи с развитием нанотехнологий [4, 5]. Однако анализ неравновесных тепловых процессов в дискретных средах даже на такой простейшей модели, как идеальные кристаллы при их классическом (не квантовом) описании, остается серьезной проблемой. Так, если для одномерного кристалла уравнения термоупругости могут быть выведены в адиабатическом приближении [3, 6], то описание процесса теплопереноса может расходиться с выводами классической теории теплопроводности [7, 8].

Один из теоретических вопросов механики дискретных сред связан с высокочастотными колебаниями кинетической и потенциальной энергий, хорошо известными по результатам численного моделирования [9]. В частности, если в начальный момент времени частицы упорядочены в идеальную кристаллическую решетку, а их скорости заданы случайно, то в кристалле инициируется динамический процесс перехода кинетической энергии в потенциальную энергию деформирования связей. Этот переход заканчивается распределением внутренней энергии между кинетическими и деформационными степенями свободы, определяемым теоремой о вириале [10]. Однако переход сопровождается высокочастотным колебательным процессом с затухающей амплитудой, не имеющим на настоящее время теоретического объяснения.

В данной работе для исследования указанных процессов выбрана модель одномерного кристалла. Это простейшая модель, позволяющая, с одной стороны, получить переход от дискретной системы к

континуальной, а с другой, продемонстрировать принципиальные различия, реализующиеся для таких систем [11–13]. Ниже предложен метод аналитического описания колебаний энергий и дано точное решение соответствующей математической задачи, а также проведено сравнение с результатами численного моделирования.

Рассмотрим одномерный кристалл: цепочку одинаковых частиц массы m , соединенных одинаковыми линейными пружинами жесткости C . Уравнения динамики цепочки имеют вид

$$\ddot{u}_k = \omega_0^2(u_{k-1} - 2u_k + u_{k+1}), \quad \omega_0 \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\frac{C}{m}}, \quad (1)$$

где u_k – перемещение k -й частицы; k – индекс, принимающий произвольные целые значения. Будем считать, что выполнены условия периодичности: $u_{k+N} = u_k$, где $N \gg 1$ – число независимых частиц.

Введем оператор осреднения по индексу для произвольной величины f_k , характеризующей движение k -й частицы,

$$\langle f_k \rangle = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N f_k. \quad (2)$$

Тогда удельные (приходящиеся на частицу) кинетическая, потенциальная и полная энергии могут быть определены формулами

$$K = \frac{1}{2} m \langle v_k^2 \rangle, \quad \Pi = \frac{1}{2} C \langle \varepsilon_k^2 \rangle, \quad E = K + \Pi, \quad (3)$$

где введены скорости частиц $v_k = \dot{u}_k$ и деформации связей $\varepsilon_k = u_k - u_{k-1}$. Очевидно, полная энергия является константой, в то время как кинетическая и потенциальная энергии зависят от времени t .

Допустим, что при $t = 0$ перемещения частиц равны нулю, а скорости распределены случайно, чему соответствует $\Pi = 0$, $K = E$. Динамика изменения энергий, полученная в результате численного интегрирования уравнений (1) при указанных начальных условиях, показана на рис. 1. Изменение

Санкт-Петербургский государственный
политехнический университет
Институт проблем машиноведения
Российской Академии наук, Санкт-Петербург

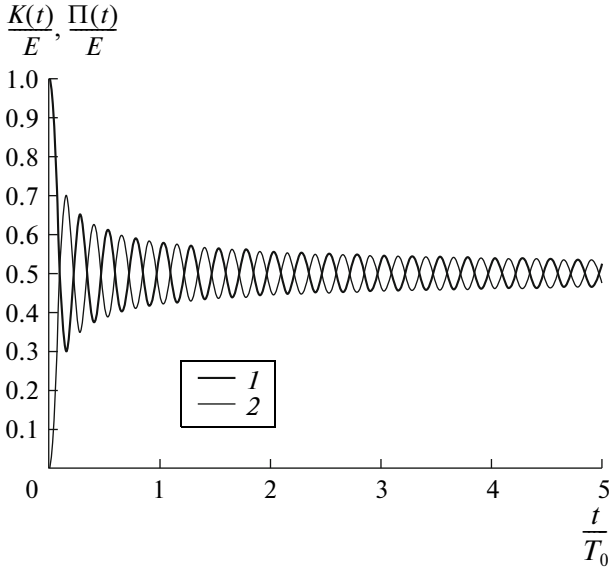


Рис. 1. Колебания кинетической (1) и потенциальной (2) энергий в одномерном кристалле.

энергий рассчитано для $N = 10^6$ и $0 \leq t \leq 5T_0$, где $T_0 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{2\pi}{\omega_0}$. Даже на таком коротком интервале времени хорошо заметно стремление энергий к предельному значению $\frac{E}{2}$, что согласуется с теоремой о вириале [10]. При этом изменение энергий носит колебательный характер с периодом, близким к $\frac{T_0}{4}$.

Получим аналитические уравнения, позволяющие описать колебания энергий. Для этого, следуя [14], введем обобщенные энергии

$$K_n \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2}m \langle v_k v_{k+n} \rangle, \quad \Pi_n \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2}C \langle \varepsilon_k \varepsilon_{k+n} \rangle, \quad (4)$$

где осреднение ведется по повторяющемуся индексу k . При $n = 0$ формулы (4) дают обычные энергии (3). Если последние определяются дисперсиями скоростей и деформаций, то обобщенные – корреляциями этих же величин для частиц, значение индекса которых отличается на n .

Дифференцирование обобщенных энергий с использованием уравнения динамики (1) позволяет получить следующие тождества:

$$\dot{K}_n + \dot{\Pi}_n = 0 \Rightarrow E_n \stackrel{\text{def}}{=} K_n + \Pi_n = \text{const}, \quad (5)$$

$$\ddot{\Pi}_n = -2\omega_0^2(L_{n-1} - 2L_n + L_{n+1}), \quad L_n \stackrel{\text{def}}{=} K_n - \Pi_n. \quad (6)$$

Тождество (5) означает, что для обобщенных энергий выполняется закон сохранения, аналогичный закону сохранения полной механической энергии; в качестве обобщенной полной энергии выступает величина E_n . При выводе тождеств (5), (6) использован постулат, что значения средних величин, вычисленных для цепочки, не меняются

при ее отражении. Данный постулат справедлив при $N \rightarrow \infty$ и позволяет использовать тождество $\langle f_k g_{k+n} \rangle = \langle f_k g_{k-n} \rangle$ для любых величин f_k, g_k и любого целого n .

Исключая из тождеств (5), (6) величины K_n и Π_n , получим дифференциально-разностное уравнение для обобщенной функции Лагранжа

$$\ddot{L}_n = 4\omega_0^2(L_{n-1} - 2L_n + L_{n+1}), \quad (7)$$

по форме совпадающее с уравнением динамики цепочки (1) и отличающееся только значением коэффициента при правой части. В силу периодичности цепочки и свойств оператора осреднения, величины L_n периодичны и четны по индексу n : $L_{n+N} = L_n, L_{-n} = L_n$.

В качестве начальных условий для уравнения (7) выступают начальные значения величин L_n и \dot{L}_n , определяемые дисперсиями и корреляциями скоростей и перемещений частиц при $t = 0$.

Положим, что начальные скорости различных частиц независимы, а начальные перемещения отсутствуют. Тогда, используя определения (4), получим при $t = 0$

$$L_n = E\delta_n, \quad \dot{L}_n = 0, \quad 0 \leq n < N, \quad (8)$$

где δ_n – символ Кронекера, равный 1 при $n = 0$ и равный 0 во всех остальных случаях.

Рассматривая (7) как систему линейных дифференциальных уравнений с начальными условиями (8), можно получить аналитическое решение, которое в пределе $N \rightarrow \infty$ принимает вид

$$L_n(t) = EJ_{2n}(4\omega_0 t), \quad (9)$$

где $J_k(\tau)$ – функции Бесселя первого рода [15]. Согласно полученному решению, функция Лагранжа $L = L_0(t)$ удовлетворяет дифференциальному уравнению Бесселя

$$\ddot{L} + \frac{1}{t}\dot{L} + 16\omega_0^2 L = 0, \quad (10)$$

которое можно трактовать как уравнение колебаний материальной точки под действием линейной пружины и силы вязкого трения с коэффициентом, обратно пропорциональным времени. При больших t формула (9) может быть представлена [15] в виде

$$L_n(t) = (-1)^n \frac{E}{\sqrt{2\pi\omega_0 t}} \cos\left(4\omega_0 t - \frac{\pi}{4}\right) + O(t^{-3/2}). \quad (11)$$

Таким образом, колебания происходят с частотой $4\omega_0$, а амплитуда колебаний обратно пропорциональна корню из времени. С использованием ре-

шения (9) удельные кинетическая и потенциальная энергии могут быть представлены в виде

$$\begin{aligned} K(t) &= \frac{E}{2}(1 + J_0(4\omega_0 t)), \\ \Pi(t) &= \frac{E}{2}(1 - J_0(4\omega_0 t)). \end{aligned} \quad (12)$$

На рис. 2 приведены результаты вычисления функции Лагранжа $L(t)$: для численного решения начальной задачи для цепочки (1); численного решения начальной задачи (7), (8) для обобщенных функций Лагранжа; аналитического решения (9). Численное решение уравнений (1) и (7) проводилось методом центральных разностей с шагом интегрирования $0.01 T_0$. Для исходной цепочки начальные скорости задавались с помощью генератора случайных чисел с равномерным распределением. Как видно из рисунка, в принятом масштабе все три графика практически неразличимы. Отметим, что если для получения требуемой точности в ходе численного решения уравнений динамики цепочки (1) потребовалось $N = 10^6$, то для уравнений (7) оказалось достаточно взять $N = 10^2$.

Таким образом, в работе получено точное аналитическое решение, согласно которому функция Лагранжа для цепочки со стохастическими начальными условиями изменяется по тому же закону, по которому происходит движение центральной частицы цепочки при детерминированных начальных условиях. Изменение кинетической и потенциальной энергий рассмотренной системы описывается функцией Бесселя, период колебаний равен $\frac{T_0}{4}$, а амплитуда колебаний обратно пропорциональна корню из времени. Из полученного решения следует, что затухание колебаний энергий определяется возбуждением корреляций, связывающих движение частиц, удаленных друг от друга. Период колебаний энергий чрезвычайно мал, поэтому в ходе этих колебаний температуру правильно связывать с полной энергией, а не с кинетической, которая постоянно переходит в потенциальную и обратно. Только после затухания переходного процесса, для которого требуются времена порядка десятков периодов T_0 , температура может быть связана с кинетической энергией, как это принято в равновесной статистической механике.

Полученное решение, с одной стороны, позволяет описать колебания энергий, возникающие при решении задач методом молекулярной динамики, с другой стороны, подобные колебания могут возникать в реальных твердых телах при быстрых переходных процессах, например, при воздействии фемтосекундных лазерных импульсов. Колебания сходной природы, согласно [13], могут вызывать разрушение в дискретных системах. Кроме того, рассмотренные в статье процессы могут послужить

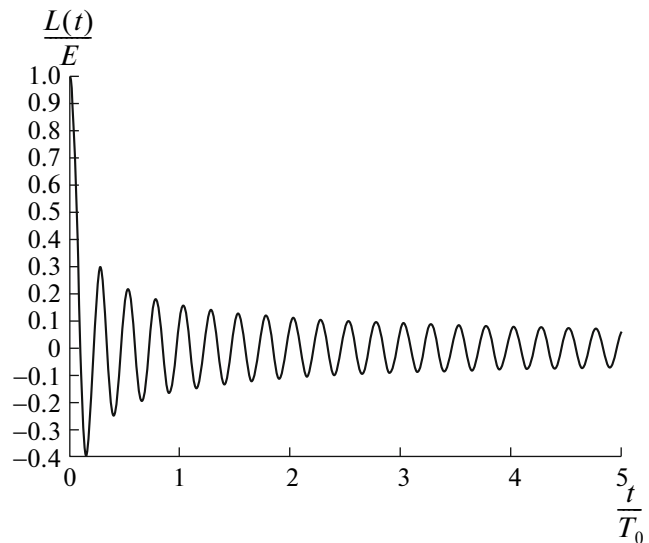


Рис. 2. Колебания функции Лагранжа.

для описания теплопроводности и внутреннего трения в кристаллических твердых телах.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Андреев А.Н. и др. Механика — от дискретного к сплошному / Под ред. В.М. Фомина. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2008. 343 с.
2. Hoover W.G. Smooth Particles Applied Mechanics. The State of the Art. World Scientific // Adv. Ser. Nonlin. Dyn. 2006. V. 25.
3. Кривцов А.М. Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой. М.: Физматлит, 2007. 304 с.
4. Гольдштейн Р.В., Морозов Н.Ф. // Физ. мезомеханика. 2007. Т. 10. № 5. С. 17–30.
5. Кривцов А.М., Морозов Н.Ф. // ФТТ. 2002. Т. 44. № 12. С. 2158–2163.
6. Krivtsov A.M. // Chaos, Solitons & Fractals. 2003. V. 17. № 1. P. 79–87.
7. Nakazawa H. // Prog. Theor. Phys. Suppl. 1970. V. 45. P. 231–262.
8. Кривцов А.М., Ле-Захаров А.А. // ДАН. 2008. Т. 420. № 1. С. 45–49.
9. Allen M.P., Tildesley A.K. Computer Simulation of Liquids. Oxford: Clarendon Press, 1987. 385 p.
10. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Механика. Т. 1. Теоретическая физика. М.: Физматлит, 2004. 224 с.
11. Слепян Л.И. Нестационарные упругие волны. Л.: Судостроение, 1972. 376 с.
12. Морозов Н.Ф., Паукито М.В. Дискретные и гибридные модели механики разрушения. СПб: Изд-во СПбГУ, 1995. 160 с.
13. Петров Ю.В., Груздков А.А., Казаринов Н.А. // ДАН. 2008. Т. 423. № 1. С. 51–55.
14. Krivtsov A.M. Proc. XXXIV Summer School “Advanced Problems in Mechanics”. St.-Petersburg, 2007. P. 261–273.
15. Справочник по специальным функциям / Под ред. М. Абрамовица, И. Стигана. М.: Наука, 1979. 830 с.