

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого
Физико-механический институт
Высшая школа теоретической механики и математической физики

Работа допущена к защите
Директор ВШТМиМФ,
д.ф.- м.н., чл-корр. РАН
_____ А. М. Кривцов
« ___ » _____ 2023 г.

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА БАКАЛАВРА

Исследование прохождения волн в составном кристалле

по направлению подготовки

01.03.03 «Механика и математическое моделирование»

направленность

1.03.03_01 «Механика и математическое моделирование сред с
микроструктурами»

Выполнил

студент гр. 5030103/90101

Б.С. Борисенков

Руководитель

Директор ВШТМиМФ,

д.ф.- м.н., чл-корр. РАН

А.М. Кривцов

Санкт-Петербург – 2023

**САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ ПЕТРА ВЕЛИКОГО**
Физико-механический институт
Высшая школа теоретической механики и математической физики

УТВЕРЖДАЮ
Директор ВШТМиМФ
А. М. Кривцов
«__»_____20__г.

ЗАДАНИЕ

на выполнение выпускной квалификационной работы

студенту Борисенкову Богдану Сергеевичу, гр. 5030103/90101

1. Тема работы: Исследование прохождения волн в составном кристалле.
2. Срок сдачи студентом законченной работы: 05.06.2023
3. Исходные данные по работе: актуальные научные публикации по теме работы.
4. Содержание работы (перечень подлежащих разработке вопросов): постановка и численное решение одномерной линейной и нелинейной задачи прохождения волны, сравнение численного решения для коэффициента прохождения с аналитическими формулами, исследование распределения энергии в замкнутой системе при больших временах, постановка и численное решение линейной двумерной задачи прохождения волны
5. Перечень графического материала (с указанием обязательных чертежей): не предусмотрено.
6. Консультанты по работе: отсутствуют
7. Дата выдачи задания: 27.02.2023

Руководитель ВКР: _____ А.М. Кривцов, директор ВШТМиМФ,

д.ф-м.н., доцент, чл.-корр. РАН.

Задание принял к исполнению: 27.02.2023

Студент: _____ Б.С. Борисенков

РЕФЕРАТ

На 37 с., 14 рисунков, 3 таблицы, 0 приложений.

**МЕХАНИКА, ТЕПЛОПЕРЕНОС, СОСТАВНОЙ КРИСТАЛЛ, ДИНАМИКА
РЕШЕТКИ, ЭНЕРГЕТИЧЕСКАЯ ДИНАМИКА, ФОНОН**

В данной работе произведено моделирование процесса теплопереноса в составном кристалле с помощью рассмотрения механической модели, а также с помощью кинетического описания. В рамках одномерной задачи приведена аналитика для потока энергии через границу. В процессе было разработано несколько программ, позволяющих пользователю численно реализовать большое количество экспериментов, связанных с одномерной и двумерной механической моделью составного кристалла. Произведено сравнение с ранее полученными аналитическими результатами.

THE ABSTRACT

37 pages, 14 pictures, 3 tables, 0 applications.

**MECHANICS, HEAT TRANSFER, COMPOSITE CRYSTAL, LATTICE DYNAMICS,
ENERGY DYNAMICS, PHONON**

In this paper, a simulation of the heat transfer process in a composite crystal is performed by considering a mechanical model, as well as using a kinetic description. In the framework of a one-dimensional problem, an analysis is given for the flow of energy across the boundary. In the process, several programs were developed that allow the user to numerically implement a large number of experiments related to a one-dimensional and two-dimensional mechanical model of a composite crystal. The comparison with the previously obtained analytical results was made.

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	6
ГЛАВА 1. ПОСТАНОВКА ОДНОМЕРНОЙ ЛИНЕЙНОЙ ЗАДАЧИ ПРОХОЖДЕНИЯ ВОЛНЫ.....	8
1.1. Описание механической модели кристаллической решетки	8
1.2. Локализованное возмущение. Коэффициент прохождения и отражения... 9	9
1.3. Моделирование прохождения волны через интерфейс	10
1.3.1. Симплектический метод Эйлера	10
1.3.2. Сравнение численных результатов с аналитикой	10
1.4. Равновесный и неравновесный процесс	12
1.4.1. Континуальная постановка	13
1.4.2. Особенности реализации в дискретной модели	13
1.4.3. Численное моделирование	15
1.4.4. Аналитика. Рекуррентные соотношения.....	18
1.4.5. Условие для равновесного состояния.....	20
1.4.6. Различие двух постановок	21
ГЛАВА 2. ПОСТАНОВКА ОДНОМЕРНОЙ НЕЛИНЕЙНОЙ ЗАДАЧИ ПРОХОЖДЕНИЯ ВОЛН.....	28
2.2. Описание механической модели кристаллической решетки	28
2.3. Локализованное возмущение. Неравновесное состояние.....	28
ГЛАВА 3. ПОСТАНОВКА ОДНОМЕРНОЙ НЕЛИНЕЙНОЙ ЗАДАЧИ ПРОХОЖДЕНИЯ ВОЛН.....	30
3.1. Уравнения динамики. Энергия системы.....	31
3.2. Локализованное возмущение. Начальные условия	32

3.3. Исследование угла преломления траектории возмущения	33
3.4. Импульс энергии	33
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	35
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ.....	36

ВВЕДЕНИЕ

Теплопередача твердых тел обусловлена сразу несколькими процессами. В зависимости от рассматриваемого вещества, основным может быть перенос тепла вследствие колебаний кристаллической решетки, перемещения свободных электронов, электромагнитного излучения, спиновых волн в магнитных материалах и другого. Например, в металлах преобладает перенос тепла за счет перемещения свободных электронов.

Моделирование прохождения волн в составном кристалле позволяет исследовать процесс переноса тепла с помощью фононов – согласованных колебаний кристаллической решетки. Данный способ теплопередачи играет существенную роль для кристаллических полупроводниковых материалов [3].

Так, в работе [14] теплопроводность для GaAs/AlAs, измеренная экспериментально, возрастает линейно с увеличением толщины сверхрешетки [1], что соответствует модели фононной теплопроводности. К тому же работы, посвященные графену, демонстрируют его уникальную теплопроводность [6], что позволяет эффективно применять его в качестве теплораспределителей для транзисторов и светоизлучающих диодов, а также наполнителей в материалах термоинтерфейса для электронных чипов [7]. Теплопроводность, не соответствующая закону Фурье, графено-содержащих материалов при низких температурах описывается с помощью исследования фононов [8]. Понимание теплового обмена на атомарном уровне имеет фундаментальное значение в вопросе регулирования теплопроводности материалов, а соответственно имеет важное практическое значение.

Встречается несколько подходов к аналитическому исследованию процесса теплопередачи фононами. В основе большого количества научных работ используется кинетическое описание и ВТЕ (Boltzmann Transport Equation) [16], где варьируется закон рассеяния фононов. Наряду с этим, возможно рассмотрение непосредственно динамики решетки с помощью задания модели взаимодействия между атомами [11]. Также, для описания взаимодействия фононов с интерфейсом используются модели АММ и ДММ [10]. Помимо этого встречается использование статистических AGF-методов (Atomistic Green Function)[5].

Целью данной работы является исследование механизма взаимодействия фононов с границей раздела двух сред: количественная оценка распределения энергии в системе при единичном прохождении и спустя большое количество столкновений с границей, а также качественное обоснование. Для достижения

данной цели решаются следующие задачи:

1. Рассмотреть линейную модель кристаллической решетки и численно решить задачу прохождения локализованного возмущения через границу, сравнить с аналитикой;
2. Рассмотреть распределение энергии в численной модели с большим количеством возмущений через продолжительный промежуток времени;
3. Составить упрощенную модель движения фононов в среде, провести сравнение с численной моделью кристаллической решетки, сделать вывод о возможности сопоставления результатов;
4. Рассмотреть модель решетки с нелинейной силой взаимодействия между элементами;
5. Рассмотреть поперечные колебания в 2D-модели кристаллической решетки: посчитать угол преломления траектории движения возмущения при переходе через границу раздела сред, посчитать отношение энергетических импульсов двух частей составной среды;

Для численного моделирования прохождения возмущения через границу используется одномерная механическая модель, в которой могут происходить только продольные акустические колебания.

Также, процесс прохождения возмущения через границу исследуется аналитически: рассматривается одновременное и последовательное прохождение одинаковых возмущений, производится качественное сравнение с результатами численного моделирования. Показывается, что нарушается закон симметрии отражения. Далее рассматривается одномерная модель, где взаимодействие атомов предполагается нелинейным (α -FPU)[18].

В последнем разделе вводится в рассмотрение более сложная двумерная модель кристаллической решетки с квадратными ячейками, в которой происходят малые поперечные колебания.

1 ГЛАВА 1. ПОСТАНОВКА ОДНОМЕРНОЙ ЛИНЕЙНОЙ ЗАДАЧИ ПРОХОЖДЕНИЯ ВОЛНЫ

В данной главе будут рассматриваться механические модели кристаллической решетки и кинетическая модель распространения фононов. Одномерные задачи являются важной отправной точкой в исследовании теплопереноса, несмотря на то, что часть информации о реальной системе теряется. Рассмотрение одномерных моделей иногда позволяет понять процессы на качественном уровне.

1.1 Описание механической модели кристаллической решетки

Вводится модель, аналогичная [15]: точечные массы, соединенные линейными пружинками (рис. 1). Неоднородность кристалла реализована с помощью различия масс. Модель состоит из N частиц. Без потери общности, принимается, что их четное количество. Сила предполагается линейно зависящей от перемещений, взаимодействуют только соседние частицы (рис. 1).

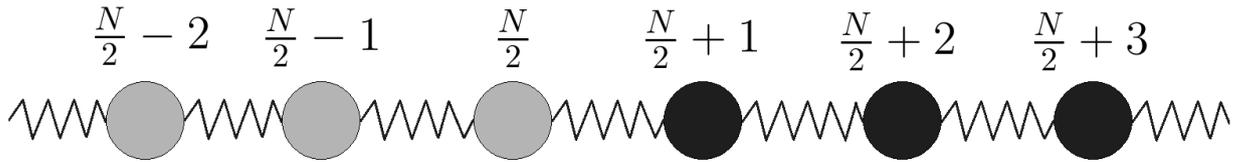


Рис. 1: Линейная одномерная модель

Тогда уравнение динамики в перемещениях имеет вид [12]:

$$\begin{cases} \ddot{u}_n = \omega_1^2(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}), & n = 1, 2, 3, \dots, \frac{N}{2} \\ \ddot{u}_n = \omega_2^2(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}), & n = \frac{N}{2} + 1, \dots, N \end{cases}, \quad (1)$$

$$\omega_1 = \sqrt{\frac{C}{m_1}}, \quad \omega_2 = \sqrt{\frac{C}{m_2}},$$

где u_n – перемещение частицы с индексом n относительно своего положения равновесия, C – жесткость пружин, m_1, m_2 – точечные массы двух частей системы.

Рассматриваются только периодические граничные условия:

$$u_{N+1} = u_1 \quad (2)$$

Таким образом, система является замкнутой, полная энергия сохраняется.

1.2 Локализованное возмущение. Коэффициент прохождения и отражения

Здесь и далее под фононом понимается согласованное колебание кристаллической решетки. В работе [13] он моделируется вещественной частью функции $e^{i(kx-\omega(k)t)}$, в работе [17] – с помощью той же функции, домноженной на огибающую.

Фонон моделируется локализованной в пространстве бегущей волной. В линейной дискретной модели она будет двигаться с групповой скоростью $v_{gr}^i = c_i \cos\left(\frac{\pi}{N}\right)$, где $c_i = a\sqrt{\frac{C}{m_i}}$, $i = 1, 2$. Начальные условия, соответствующие нашей модели фонона с частотой $\omega(k)$, заимствованные из [11]:

$$\begin{aligned} u_n(t=0) &= A \cos \frac{2\pi(n-n_0)}{N_\lambda} - 1, \\ \dot{u}_n(t=0) &= A\omega_i \sin \frac{2\pi(n-n_0)}{N_\lambda}, \end{aligned} \quad i = 1, 2. \quad (3)$$

где n – номер частицы, n_0 – номер частицы, откуда начинается волна, N_λ – количество частиц в одном периоде волны.

Для количественного исследования процесса прохождения возмущения, которому соответствуют начальные условия (2), вводится в рассмотрение энергия n -ой частицы:

$$E_n = \frac{1}{2}\Pi_{n-\frac{1}{2}} + K_n + \frac{1}{2}\Pi_{n+\frac{1}{2}}, \quad K_n = \frac{1}{2}m_n\dot{u}_n^2, \quad \Pi_n = \frac{1}{2}C(u_{n+\frac{1}{2}} - u_{n-\frac{1}{2}}) \quad (4)$$

Тогда очевидно, что энергия левой части цепочки (E_1) и правой (E_2) будет выражаться как:

$$E_1 = \sum_{n=1}^{\frac{N}{2}} E_n, \quad E_2 = \sum_{n=\frac{N}{2}+1}^N E_n \quad (5)$$

Формалубы для коэффициентов прохождения и отражения энергии при переходе из одной части составного кристалла в другую имеют следующий вид:

$$K_1 = \frac{E_1}{E_0}, \quad K_2 = \frac{E_2}{E_0} = 1 - K_1, \quad (6)$$

где K_1 – коэффициент отражения, K_2 – коэффициент прохождения, E_1 – энергия отраженной волны, E_0 – энергия исходной волны до столкновения, E_2 – энергия

прошедшей волны.

1.3 Моделирование прохождения волны через интерфейс

В данном разделе производится численное моделирование прохождения волны через интерфейс с помощью симплектического метода Эйлера(NSV).

1.3.1 Симплектический метод Эйлера

Данный метод является модификацией стандартного метода Эйлера с глобальной ошибкой $O(\Delta t)$. Его особенность заключается в том, что, по сравнению с обычным методом, он сохраняет энергию (является симплектическим) в системе.

Пусть имеется пара дифференциальных уравнений и начальные условия:

$$\frac{dx}{dt} = f(t, v), \quad \frac{dv}{dt} = g(t, x), \quad x(t_0) = x_0, \quad v(t_0) = v_0, \quad (7)$$

где f, g – заданные функции, x, v – скаляры или векторы.

Тогда приближенное дискретное решение на каждой итерации будет вычисляться по формулам:

$$\begin{aligned} v_{k+1} &= v_k + g(t_k, x_k)\Delta t, \\ x_{k+1} &= x_k + f(t_k, v_{k+1})\Delta t, \end{aligned} \quad (8)$$

где Δt – шаг дискретизации. Берется пропорциональным $o(T)$, где T – самый маленький период колебаний элемента модели, k – номер шага по времени. То есть, если $m_1 < m_2$, то $\Delta t \sim o(\frac{2\pi}{\omega_1})$.

Дискретные уравнения, необходимые для моделирования системы (1) данным методом:

$$\begin{cases} \dot{u}_{i+1}^{k+1} = \omega_1^2 \Delta t (u_{i+1}^k - 2u_i^k + u_{i-1}^k) \\ u_{i+1} = u_i + \dot{u}_{i+1}^{k+1} \Delta t \end{cases} \quad i = 1, 2, \dots, \frac{N}{2}, \quad (9)$$

$$\begin{cases} \dot{u}_{i+1}^{k+1} = \omega_2^2 \Delta t (u_{i+1}^k - 2u_i^k + u_{i-1}^k) \\ u_{i+1} = u_i + \dot{u}_{i+1}^{k+1} \Delta t \end{cases} \quad i = \frac{N}{2} + 1, \frac{N}{2} + 2, \dots, N$$

1.3.2 Сравнение численных результатов с аналитикой

В данном разделе производится сравнение численных результатов с аналитической формулой для коэффициентов (6), полученной в работе [16], а также с

формулой для длинных волн [2]. Для нашего случая формула В.А. Кузькина будет иметь вид:

$$K_2^{\text{ex}}(\omega) = \frac{2m_1m_2\sqrt{\frac{4C}{m_1} - \omega^2}\sqrt{\frac{4C}{m_2} - \omega^2}}{2Cm_1 + 2Cm_2 - m_1m_2\omega^2 + m_1m_2\sqrt{\frac{4C}{m_1} - \omega^2}\sqrt{\frac{4C}{m_2} - \omega^2}}, \quad (10)$$

$$K_1^{\text{ex}}(\omega) = 1 - K_2^{\text{ex}},$$

где $\omega = \omega(k) = \frac{4C}{m_1} \sin\left(\frac{k}{2}\right)$.

Формула для длинных волн в нашем случае:

$$K_2^{\text{long}} = \frac{4\nu}{(1+\nu)^2}, \quad K_1^{\text{long}} = 1 - K_2^{\text{long}} = \frac{(1-\nu)^2}{(1+\nu)^2}, \quad (11)$$

где $\nu = \sqrt{\frac{m_2}{m_1}}$ – отношение скоростей звука.

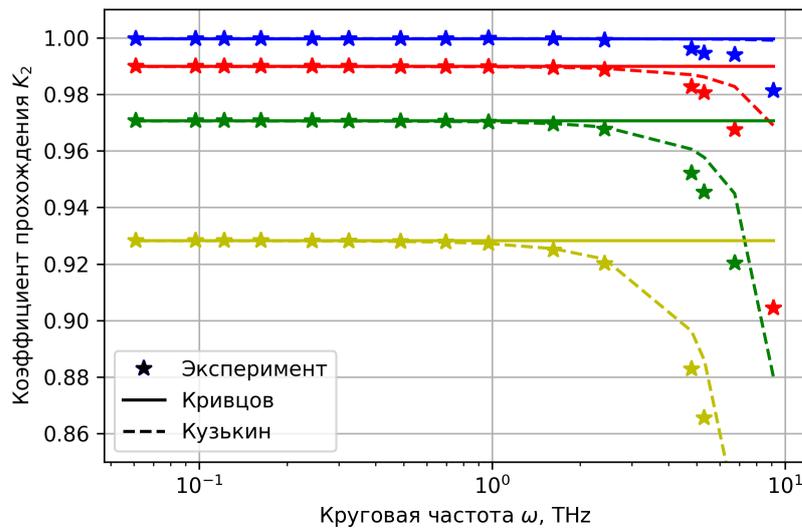


Рис. 2: Коэффициент прохождения в зависимости от частоты для разного отношения масс, сравнение численного эксперимента с аналитическими формулами. Цвета соответствуют разным значениям отношения масс. Синий: $\frac{m_2}{m_1} = 1.08$, красный: $\frac{m_2}{m_1} = 1.5$, зеленый: $\frac{m_2}{m_1} = 2$, желтый: $\frac{m_2}{m_1} = 3$

Аналитические формулы хорошо описывают эксперимент (рис. 2). Точность увеличивается по мере увеличения длины волны начального возмущения. В области высоких частот идет расхождение с точной формулой (10) в связи с большим вкладом в энергию волны, бегущей в другую сторону.

На рис. 3 производится сравнение с результатами численного эксперимента для коэффициента прохождения из статьи [6]. В данной статье рассматривается модель интерфейса Si-Ge (3D fcc решетка).

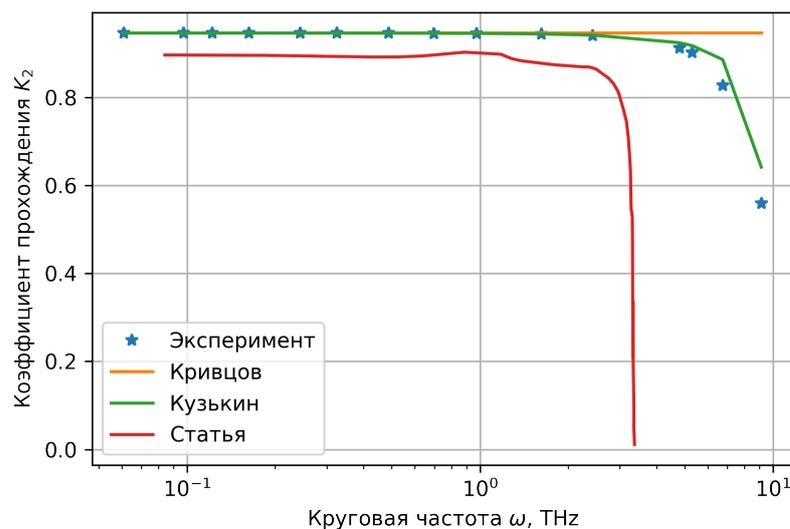


Рис. 3: Значения коэффициента прохождения для Si-Ge в зависимости от частоты начального возмущения

Расхождение с численным экспериментом в нашей модели объясняется разной размерностью задачи. Несмотря на это, качественно кривая ведет себя так же, как и в одномерном случае.

1.4 Равновесный и неравновесный процесс

Под равновесным процессом в системе, заданной уравнениями (1), понимается нулевой поток энергии через интерфейс и нулевые удельные потоки в каждой точке пространственной координаты. То есть состояние, при котором энергия, вышедшая из части с одними свойствами равна энергии, пришедшей в эту часть (среду) в каждый момент времени, при том, что в каждой точке обеих сред энергия бежит одинаково в обе стороны. С макроскопической точки зрения в реальной физической системе этот процесс может интерпретироваться как сохранение температуры каждой из моделируемых сред. Это означает, что в случае равновесного процесса при разных начальных энергиях в двух контактирующих средах будет реализоваться скачок температуры на границе, так называемый эффект Капицы [2]. Очевидно, что интерпретация энергии фононов в качестве температуры среды возможна лишь для определенных веществ и определенного диапазона температур, когда фононы играют преобладающую роль в теплообмене.

Неравновесный процесс реализуется тогда, когда из одной части среды вытекает больше энергии, чем втекает из другой.

В следующем разделе рассматривается упрощенная модель для исследова-

ния вышеупомянутых процессов.

1.4.1 Континуальная постановка

Пусть частицам системы (1) с индексами $n = 1, 2, \dots, \frac{N}{2}$ соответствует континуальная координата $x < 0$, а частицам с индексами $n = \frac{N}{2} + 1, \frac{N}{2} + 2, \dots, N$ соответствует $x \geq 0$. Если разложить систему (1) в ряд Тейлора относительно перемещения в n -ой точке и оставить слагаемые вплоть до квадратичного, то получатся два волновых уравнения:

$$\begin{cases} \rho_1 \ddot{u}(x) = Du''(x), & x < 0, \\ \rho_2 \ddot{u}(x) = Du''(x), & x \geq 0, \end{cases} \quad (12)$$

$$\rho_1 = \frac{m_1}{a}, \quad \rho_2 = \frac{m_2}{a}, \quad D = Ca,$$

где a – равновесное расстояние между точечными элементами модели (1).

Данным уравнениям соответствуют решения в виде бегущих в обе стороны возмущений со скоростями $c_1 = \sqrt{\frac{C}{m_1}}$, $c_2 = \sqrt{\frac{C}{m_2}}$ соответственно. В работе [2] для континуальной модели и бегущих в обе стороны возмущений описано условие, при котором реализуется равновесный процесс. В среде, соответствующей $x < 0$, задан поток возмущений, бегущих вправо и точно такой же поток возмущений, бегущих влево. Пусть в среде, соответствующей $x \geq 0$, аналогично первой среде, задан такой же поток возмущений. Для потока через границу необходимо, чтобы выполнялось:

$$\frac{c_1 b_2}{c_2 b_1} = \frac{E^{(2)}}{E^{(1)}}, \quad (13)$$

где b_1, b_2 – среднее расстояние между энергетическими центрами возмущений в двух средах соответственно, $E^{(1)}, E^{(2)}$ – средние значения энергии возмущения в двух средах соответственно.

Очевидно, что неравновесный процесс реализуется при невыполнении условия (13).

1.4.2 Особенности реализации в дискретной модели

Для корректного проведения численного эксперимента в модели, заданной уравнениями (1), необходимо учесть все ограничения, накладываемые на модель и начальные возмущения, приведенные в работе [2].

Первое ограничение состоит в том, что возмущения должны не перекрывать друг друга в пространстве. Так же, в связи с тем, что формула (13) была выведена из соображений, основанных на континуальной постановке, в эксперименте следует использовать возмущения достаточно большой длины волны. Основываясь на сравнении результатов численного подсчета коэффициента прохождения с аналитикой для волн разной длины (рис. 2), можно сказать, что волны больше 30-40 частиц являются достаточно длинными.

Для реализации равновесного состояния, соответствующего формуле (13), необходимо выполнить следующие шаги:

1. Задать возмущения в первой среде со средней энергией $E^{(1)}$ и средним расстоянием между возмущениями b_1 ;
2. Задать b_2 ;
3. Найти среднее значение для амплитуды возмущений в среде 2, исходя из формулы равновесного состояния;

Для нахождения амплитуды волны, необходимо найти выражение для энергии возмущения, заданного формулами (3), используя выражения (4). Необходимо проинтегрировать энергию n -ой частицы по периоду волны.

$$\int_0^{T^*} K_n dt = \int_0^{T^*} \frac{A^2}{2} m_n \omega_i^2 \frac{1 - \cos[2k(n - n_0) - \omega t]}{2} dt = CA^2 \sin^2 \frac{k}{2},$$

$$\int_0^{T^*} \frac{1}{2} (\Pi_{n+\frac{1}{2}}^2 + \Pi_{n-\frac{1}{2}}^2) dt = \frac{C}{2} (3A^2 - 2A^2 [\frac{1}{2} \cos(k) - 1]) = \frac{CA^2}{2} [1 - \cos \frac{k}{2}], \quad (14)$$

$$\epsilon = \int_0^{T^*} E_n dt = CA^2 (\sin^2 \frac{k}{2} + \frac{1}{2} [1 - \cos \frac{k}{2}]) = 2CA^2 [1 - \cos \frac{k}{2}],$$

где $k = \frac{2\pi}{N\lambda}$ – волновое число, ϵ – энергия волны, заданной формулами (3).

Тогда для случая, когда волны в двух средах имеют одинаковую длину волны, можно записать следующее условие равновесного состояния:

$$\frac{c_1 b_2}{c_2 b_1} = \frac{A_1^2 [1 - \cos(k)]}{A_2^2 [1 - \cos(k)]} = \frac{A_1^2}{A_2^2}, \quad (15)$$

где A_1 – амплитуда волн в среде 1, A_2 – в среде 2.

Исходя из этого, амплитуда возмущений в среде 2, необходимая для уста-

новления равновесного состояния, выражается как (берется одно из решений):

$$A_1 = \sqrt{\frac{c_1 b_2}{c_2 b_1}} A_2 \quad (16)$$

Варьируя b_2 , можно получить разные значения для амплитуды.

1.4.3 Численное моделирование

Численное моделирование производится в двух постановках. Первая соответствует системе уравнений (1) с начальными условиями, необходимыми для реализации равновесного и неравновесного состояния (13), при этом считается, что возмущениям из континуальной постановки соответствуют возмущения, заданные начальными условиями (3).

Пусть $E_1(t), E_2(t)$ – энергия первой и второй среды соответственно. Вводятся функции:

$$\delta E(t) = \frac{\Psi(t) - \Psi_0}{\Psi_0}, \quad \Psi(t) = E_1(t) - E_2(t), \quad \Psi_0 = \Psi(0), \quad (17)$$

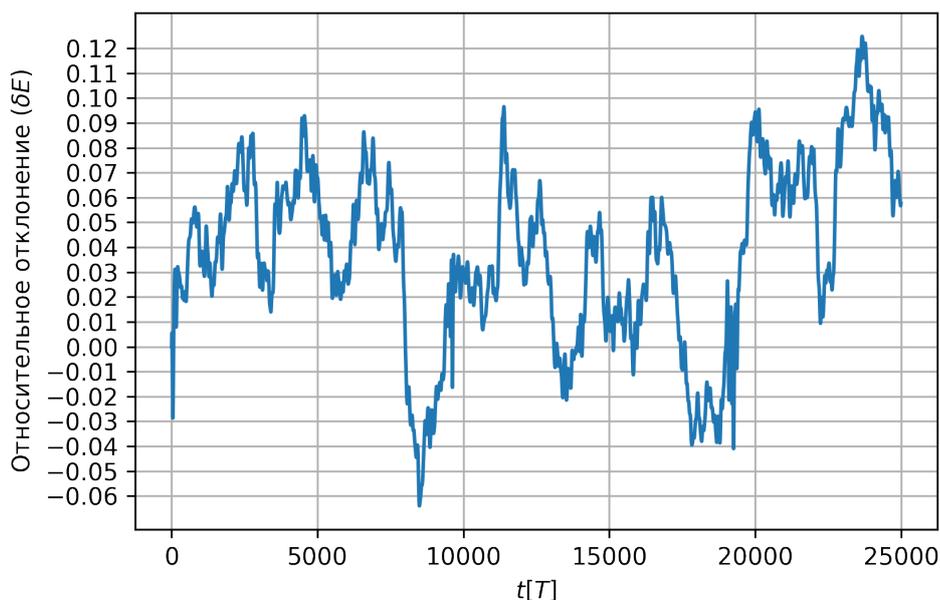


Рис. 4: Равновесное состояние. График относительного отклонения разницы энергий

Наблюдаются небольшие отклонения от начального состояния. Сравнение

графика равновесного и неравновесного состояния при небольших отклонениях от формулы (13):

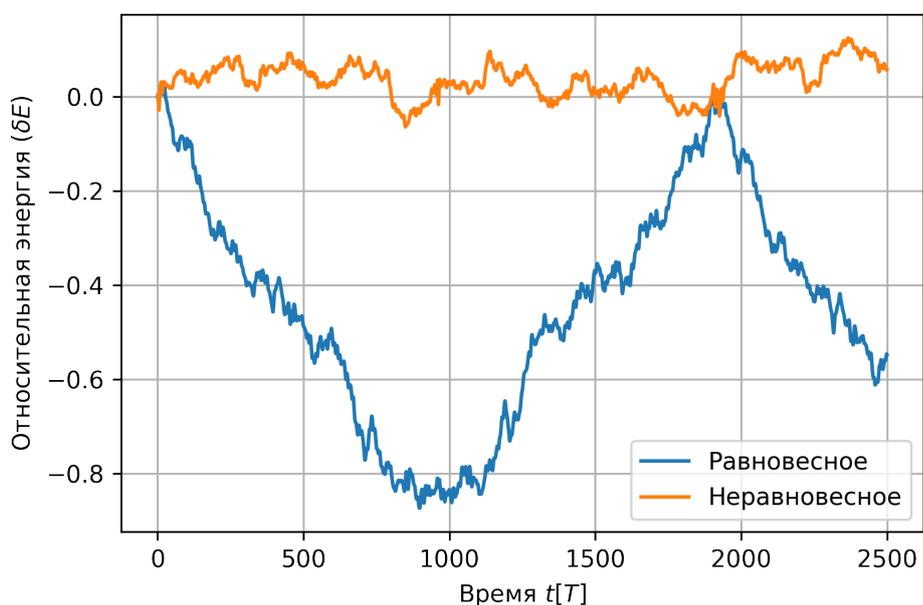
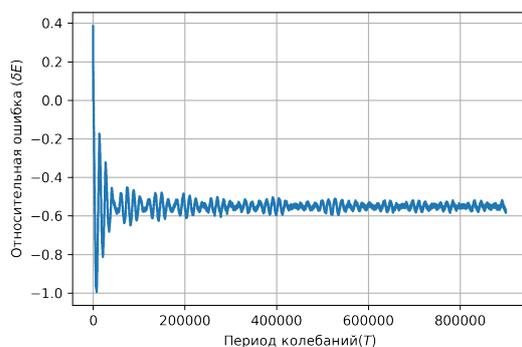
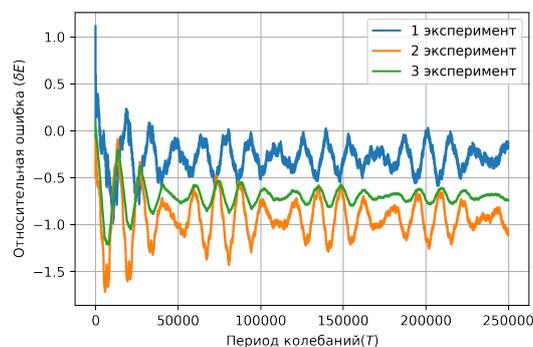


Рис. 5: Равновесное состояние. Первая постановка

Колебания графика связаны с дисперсией, которой нет в континуальной модели, а также с плотностью потока возмущений. Несмотря на это, отклонения графика в равновесном процессе меньше, чем в неравновесном, при том, что отклонения от формулы (13) были незначительные во втором случае. Далее исследуется эволюция энергии в системе, где задан неравновесный процесс:



(а) Отклонение разницы энергий в системе на больших временах



(б) Сравнение экспериментов с разными начальными условиями

Рис. 6: Неравновесное состояние

В отличие от равновесного состояния, график представляет собой слабо затухающие биения (рис. 6). Такая картина наблюдается при тех начальных условиях, которые не удовлетворяют условию (13) (рис. 6b).

Альтернативная постановка заключается в интерпретации фонона как частицы, движущейся со скоростью звука среды и несущей энергию. Задаются частицы, расположенные случайным образом в двух средах. При достижении границы, частица проходит, но ее энергия уменьшается, а также образуется частица в среде, из которой летела исходная, и начинает бежать в противоположную сторону. При этом энергия прошедшей частицы принимается, согласно формулам (11), $E_2 = K_2^{\text{long}} E$, а отраженной – $E_1 = K_1^{\text{long}} E$, где E – энергия исходной частицы.

Сравнение графиков энергии двух постановок в неравновесном процессе:

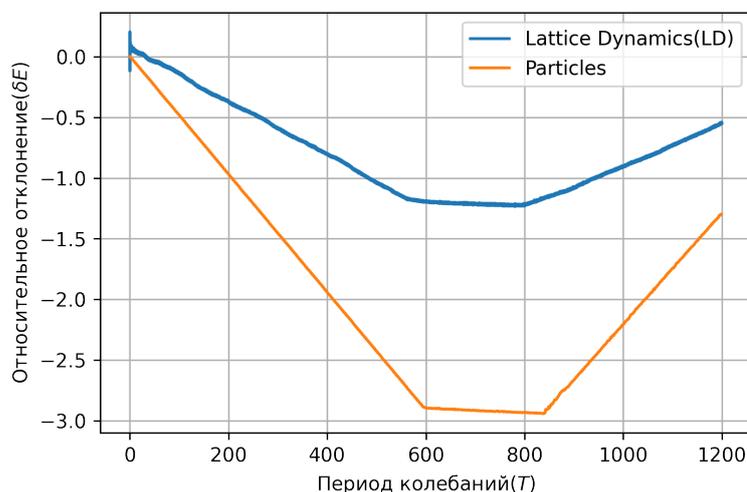


Рис. 7: Неравновесное состояние. Синий график - первая постановка, соответствующая модели (1), оранжевый - модель с частицами, δE – относительное отклонение разницы энергии в двух средах от начального значения, T – период колебания одного элемента среды 1

На рис. 7 произведено сравнение двух численных экспериментов. Начальные условия заданы так, что формула (13) не выполняется. В данном случае характер зависимости похожий, но значения сильно отличаются: исходя из первой постановки, больше энергии остается в первой среде. Спустя время энергия во второй среде начинает перетекать обратно и график возрастает. Из графика для второй постановки следует, что энергия почти полностью проходит во вторую среду (в связи с большим коэффициентом прохождения) до того, как начнет перетекать обратно.

В следующем разделе подлежит рассмотрению модель для исследования функции $\Psi(t)$ при $t \rightarrow \infty$.

1.4.4 Аналитика. Рекуррентные соотношения

В этом разделе в качестве модели используется континуальная модель (12). Вводятся новые обозначения:

$$E_n^1 = E_1(t_n), \quad E_n^2 = E_2(t_n), \quad (18)$$

где t_n – дискретные моменты времени. Рассматривается энергия в среде 1 и среде 2, соответствующая t_n -ым.

Вводится в рассмотрение замкнутая система из двух одинаковых по длине, соединенных друг с другом одномерных сред. Принимается, что существуют точки одномерного пространства с ненулевой энергией. В обеих средах энергия может перемещаться только со скоростью звука, характерной для среды. В среде 1 частицы двигаются только со скоростью c_1 , в среде 2 – со скоростью c_2 (рис. 7):

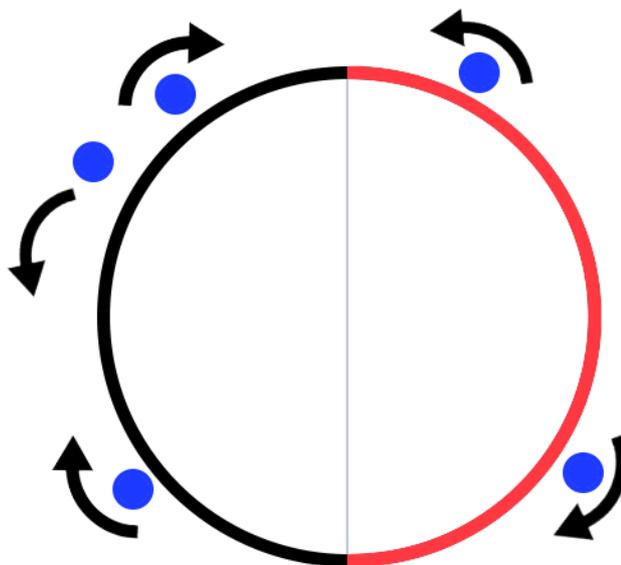


Рис. 8: Схематическое изображение модели. Черная полуокружность - среда 1, красная - среда 2. Синие круги схематически изображают точки с ненулевой энергией, бегущие вдоль полуокружности в одном или противоположном направлении, которое указывает черная стрелка

Принимается, что когда энергия доходит до границы, часть ее проходит, а часть отражается. Пусть исходная энергия в точке границы в какой-то момент времени была E , тогда отраженная и прошедшая энергия будут, аналогично условию (11):

$$E_1 = K_1 E, \quad E_2 = K_2 E, \quad (19)$$

Вводятся рекуррентные соотношения, описывающие переход энергии из

одной среды в другую:

$$\begin{cases} E_n^1 = K_1 E_{n-1}^1 + K_2 \frac{c_2}{c_1} E_{n-1}^2, \\ E_n^2 = K_2 E_{n-1}^1 + (1 - K_2 \frac{c_2}{c_1}) E_{n-1}^2 \end{cases} \quad (20)$$

Соотношения (20) утверждают, что к моменту t_n , когда вся энергия среды 1 успела дойти до границ и разделиться, лишь часть энергии среды 2 успела дойти до границ. Часть, успевшая дойти до границ, постулируется как $\frac{c_2}{c_1} E_{n-1}^2$. Условие (17) в матричном виде:

$$\begin{pmatrix} E_n^1 \\ E_n^2 \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} E_{n-1}^1 \\ E_{n-1}^2 \end{pmatrix}, \quad A = \begin{bmatrix} K_1 & K_2 \frac{c_2}{c_1} \\ K_2 & 1 - K_2 \frac{c_2}{c_1} \end{bmatrix} \quad (21)$$

При этом выполняется закон сохранения энергии (если сложить оба уравнения):

$$E_n^1 + E_n^2 = E_{n-1}^1 + E_{n-1}^2 \quad (22)$$

Из условия (21) можно получить энергию на n -ом шаге через начальные значения:

$$\begin{pmatrix} E_n^1 \\ E_n^2 \end{pmatrix} = A^n \begin{pmatrix} E_0^1 \\ E_0^2 \end{pmatrix} \quad (23)$$

Для того, чтобы возвести матрицу A в степень n , проще всего выразить ее через диагональную матрицу, домноженную на матрицы перехода:

$$A = PDP^{-1}, \quad P = \begin{pmatrix} v_1 & v_2 \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}, \quad (24)$$

где P – матрица перехода, v_1, v_2 – собственные векторы матрицы A , D – диагональная матрица, λ_1, λ_2 – собственные числа матрицы A .

Из формулы (24) легко получить выражение для A^n :

$$A^n = PD^nP^{-1} \quad (25)$$

Найденные собственные числа матрицы A :

$$\begin{cases} \lambda_1 = \frac{K_1 c_1 - K_2 c_2 + c_1 - \sqrt{K_1^2 c_1^2 + 2K_1 K_2 c_1 c_2 - 2K_1 c_1^2 + 4K_2^2 c_1 c_2 + K_2^2 c_2^2 - 2K_2 c_1 c_2 + c_1^2}}{2c_1} \\ \lambda_2 = \frac{K_1 c_1 - K_2 c_2 + c_1 + \sqrt{K_1^2 c_1^2 + 2K_1 K_2 c_1 c_2 - 2K_1 c_1^2 + 4K_2^2 c_1 c_2 + K_2^2 c_2^2 - 2K_2 c_1 c_2 + c_1^2}}{2c_1} \end{cases} \quad (26)$$

Из семейства собственных векторов выбраны следующие:

$$v_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{c_1}{K_2 c_2}(\lambda_1 - K_1) \end{pmatrix}, \quad v_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{c_1}{K_2 c_2}(\lambda_2 - K_1) \end{pmatrix}, \quad (27)$$

Используя формулы (24-27), можно получить формулу для функций Ψ , E_n^1 , E_n^2 в дискретные моменты времени.

Сравнение значений, полученных с использованием постановки в виде частиц, со значениями, полученными с помощью формул (20):

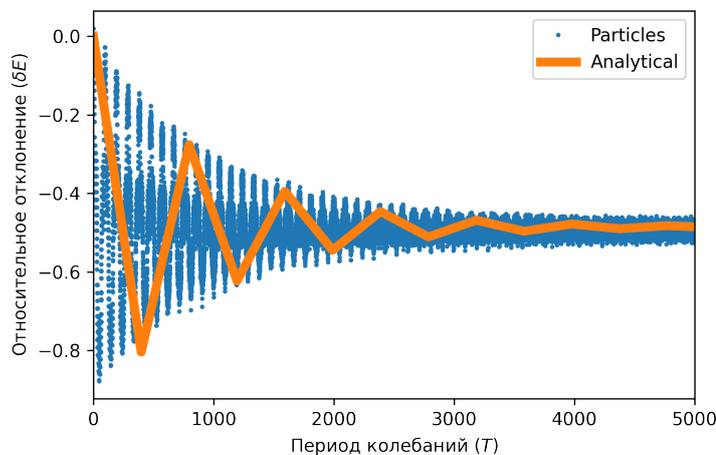


Рис. 9: Неравновесное состояние. Сравняются экспериментальные данные с аналитическими значениями

Таким образом, рекуррентные формулы хорошо описывают постановку в виде частиц, но не подходят для исследования энергии в системе (1). Такое сходение наблюдается для любых начальных условий.

1.4.5 Условие для равновесного состояния

В этом разделе демонстрируется, что условие равновесного состояния для системы, которой удовлетворяют уравнения (20), совпадает с условием, введенным ранее из других соображений. Равновесное состояние понимается как неизменность энергии в каждой среде. В рамках рекуррентной модели оно запишется как:

$$\begin{cases} E_{n-1}^1 = K_1 E_{n-1}^1 + K_2 \frac{c_2}{c_1} E_{n-1}^2, \\ E_{n-1}^2 = K_2 E_{n-1}^1 + (1 - K_2 \frac{c_2}{c_1}) E_{n-1}^2 \end{cases} \quad (28)$$

Из первого уравнения с учетом (6) легко получается соотношение:

$$\frac{E_{n-1}^1}{E_{n-1}^2} = \frac{c_2}{c_1} \quad (29)$$

В нашей системе энергию переносят локализованные возмущения, в связи с этим суммарная энергия каждой среды выражается как (опускаем индекс в связи с тем, что энергия на каждом шаге одинаковая):

$$E^1 = N_1 E^{(1)}, \quad E^2 = N_2 E^{(2)} \quad (30)$$

где N_1 – количество возмущений в среде 1, N_2 – в среде 2, $E^{(1)}$, $E^{(2)}$ – удельная энергия каждой из сред.

Выражение для N_1 и N_2 :

$$N_1 = \frac{L}{b_1}, \quad N_2 = \frac{L}{b_2}, \quad (31)$$

где L – длина каждой из сред, b_1 , b_2 – среднее расстояние между энергетическими центрами возмущений.

С учетом (30,31), выражение (29) принимает вид:

$$\frac{E^{(1)}}{E^{(2)}} = \frac{c_2 b_1}{c_1 b_2} \quad (32)$$

Условие (32) совпадает с введенным ранее, (13).

Таким образом, было показано, что рекуррентные соотношения могут быть применимы для описания эволюции энергии в континуальной модели. Следующий раздел освещает причины расхождения результатов двух моделей: показывает их несоответствие.

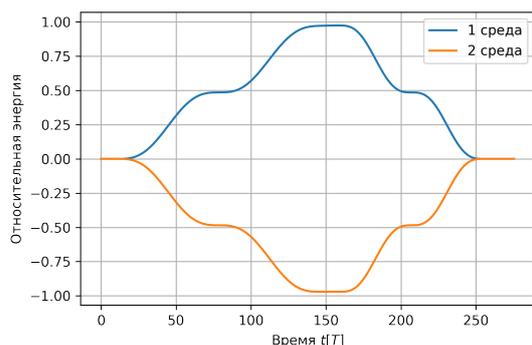
1.4.6 Различие двух постановок

В модели с частицами постулируется закон симметрии отражения и отсутствие взаимодействия частиц друг с другом. Проводится численный эксперимент, который показывает несоблюдение этих ограничений в ряде случаев (для дискретной модели): задается по одному возмущению, каждое из которых обладает одной и той же начальной энергией, в обеих средах. Волны бегут к границе раздела сред. Рассматриваются две вариации:

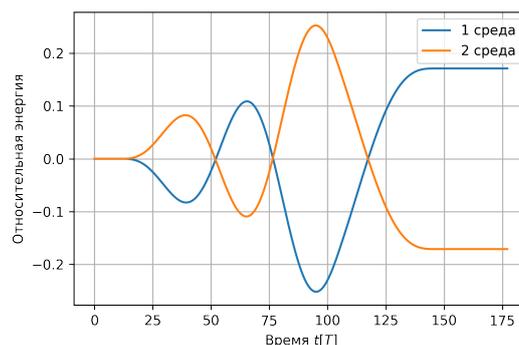
1. Возмущения последовательно проходят интерфейс;
2. Возмущения одновременно проходят интерфейс.

После представления результатов моделирования приводится аналитическое доказательство состоятельности результатов двух экспериментов.

Численное моделирование двух ситуаций:



(а) Последовательное прохождение возмущений



(б) Одновременное прохождение возмущений

Рис. 10: Взаимодействие волн с интерфейсом

В первом случае (рис. 9а) демонстрируется закон симметрии отражения: из-за того, что начальные энергии возмущений равны, то после переходного состояния значения энергий должны вернуться к начальным.

Кардинально другое поведение представлено на рис 9б. После одновременного прохождения энергии двух систем не выравниваются. Происходит некое взаимодействие волн на интерфейсе.

Для аналитического исследования данной проблемы используется формула мощности сил, действующих на каждый элемент модели (1), полученная в работе [11]:

$$\eta_n = \frac{1}{2}(v_{n+\frac{1}{2}} + v_{n-\frac{1}{2}})F_n, \quad F_n = C(u_{n+\frac{1}{2}} - u_{n-\frac{1}{2}}), \quad (33)$$

Тогда из условия, что взаимодействуют только соседние частицы, поток энергии через интерфейс в составной среде выражается как (рассматривается одна граница):

$$\dot{E}_1 = \frac{C}{2}(v_{n+1} + v_n)(u_{n+1} - u_n), \quad (34)$$

где $n, n + 1$ — частицы на интерфейсе.

В левой и правой части задано по одной волне. Рассматривается случай по-

следовательного прохождения волн. Тогда:

$$\delta E = \int_0^{T_1^*} \eta_{n+\frac{1}{2}} dt + \int_0^{T_2^*} \eta_{n+\frac{1}{2}} dt, \quad (35)$$

где δE – разница энергий в двух средах после прохождения обеих волн границы, T_1^*, T_2^* – их периоды.

Интегрирование мощности по периоду волн в результате дает поток энергии за все время прохождения интерфейса, что понимается как абсолютная разница энергий двух сред.

Приводится рассмотрение первого интеграла. Волна бежит из среды 1 в среду 2. Из того условия, что набегающая волна делится на прошедшую и отраженную, можно записать:

$$\begin{cases} u_n = A_1[\cos(k_1 n - \omega_1(k_1)t) - 1] - A_1^{\text{отр}}[\cos(k_1 n - \omega_1(k_1)t) - 1], \\ v_n = \omega_1(k_1)A_1 \sin(k_1 n - \omega_1(k_1)t) + \omega_1 A_1^{\text{отр}} \sin(k_1 n - \omega_1(k_1)t), \\ u_{n+1} = A_1^*[\cos(k_1^* n - \omega_2(k_1^*)t + k_1^*) - 1], \\ v_{n+1} = \omega_2 A_1^* \sin(k_1^* n - \omega_2(k_1^*)t + k_1^*), \end{cases} \quad (36)$$

где $A_1, A_1^{\text{отр}}$ – амплитуды набегающей и отраженной волны соответственно, A_1^* – прошедшей, k_1^* – ее волновое число. Волновые числа отраженной и набегающей волн берутся равными k_1 .

Без потери общности принимается $n = 0$. Выражение для мощности на границе имеет вид:

$$\begin{aligned} \eta_{n+\frac{1}{2}} = & \frac{C}{2} [\omega_1(A_1 + A_1^{\text{отр}}) \sin(-\omega_1 t) + \omega_2 A_1^* \sin(k_1^* - \omega_2 t)] \times \\ & \times [A_1^* (\cos(k_1^* - \omega_2 t) - 1) - (A_1 - A_1^{\text{отр}}) (\cos(-\omega_1 t) - 1)], \end{aligned} \quad (37)$$

На данном этапе следует заметить, что $\omega_1(k_1) = \omega_2(k_1^*)$ при $k_1 \rightarrow 0$:

$$\omega_1(k_1) = 2\sqrt{\frac{C}{m_1}} \sin \frac{k_1}{2}, \quad \lim_{k_1 \rightarrow 0} \omega_1 = 2\sqrt{\frac{C}{m_1}} \frac{k_1}{2} = 2\sqrt{\frac{C}{2m_1}} \frac{k_1^*}{2} = \omega_2(k_1^*) \quad (38)$$

Выражение (38) получено с использованием того факта, что длинные волны распространяются со скоростью звука в среде. Далее приводится пошаговое интегри-

рование осциллирующих частей:

$$\int_0^{T^*} \sin(-\omega_1 t) \cos(k_1^* - \omega_2 t) dt = \int_0^{T^*} \left[\frac{1}{2} \sin(-2\omega_1 t) \cos(k_1^*) - \frac{1 - 2\cos^2(-\omega_2 t)}{2} \sin(k_1^*) \right] dt = -\frac{1}{2} \sin(k_1^*),$$

$$\int_0^{T^*} \cos(-\omega_1 t) \sin(k_1^* - \omega_2 t) dt = \int_0^{T^*} \left[\sin(k_1^*) \frac{1 + \cos(2\omega_1 t)}{2} - \cos(k_1^*) \frac{1}{2} \sin(2\omega_1 t) \right] dt = \frac{1}{2} \sin(k_1^*).$$

Остальные слагаемые дадут 0 после интегрирования. Интеграл от выражения (37) принимает вид:

$$\int_0^{T_1^*} \eta_{n+\frac{1}{2}} dt = \langle \eta_1 \rangle = -\frac{C}{2} \sin(k_1^*) \omega_1 A_1 A_1^*. \quad (39)$$

Рассматривается прохождение второй волны. Выражения для перемещений и скоростей на границе могут быть записаны в виде:

$$\begin{cases} u_1 = A_2 [\cos(k_2 - \omega_2(k_2)t) - 1] + A_2^{\text{отп}} [\cos(k_2 - \omega_2(k_2)t) - 1], \\ v_1 = -\omega_2(k_2) A_2 \sin(k_2 - \omega_2(k_2)t) + \omega_2 A_2^{\text{отп}} \sin(k_2 - \omega_2(k_2)t), \\ u_0 = A_2^* [\cos(-\omega_1(k_2^*)t) - 1], \\ v_0 = \omega_1(k_2^*) A_2^* \sin(-\omega_1(k_2^*)t), \end{cases} \quad (40)$$

где, аналогично (31), A_2 , $A_2^{\text{отп}}$ соответствуют исходной и отраженной волнам, A_2^* - прошедшей, k_2^* - волновое число прошедшей. Волновые числа отраженной и набегающей волн берутся равными k_2 .

Несложно получить выражение для второго интеграла:

$$\int_0^{T_2^*} \eta_{n+\frac{1}{2}} dt = \langle \eta_2 \rangle = \frac{C}{2} \sin(k_2) \omega_2 A_2 A_2^*, \quad (41)$$

Тогда, выражение (30) переписывается в виде:

$$\delta E = \frac{C \omega_2}{2} A_1 [A_2^* \sin(k_2) - A_1^* \sin(k_1^*)]. \quad (42)$$

Выражения для A_1^* и A_2^* заимствуются из работы [2], в которой рассматри-

вается континуальная постановка:

$$A_1^* = A_1 \frac{2\nu_1}{\nu_1 + 1}, \quad A_2^* = A_2 \frac{2\nu_2}{\nu_2 + 1}, \quad \nu_1 = \frac{c_2}{c_1} = \frac{1}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\nu_2}. \quad (43)$$

С учетом того, что начальные амплитуды волн одинаковы ($A_1 = A_2$), и того, что $k_1^* = \sqrt{2}k_1$, получается тождество:

$$\delta E = \frac{C}{2} \omega_2 A_1 (A_2^* k_2 - A_1^* \sqrt{2} k_2) = \frac{C}{2} \omega_2 A_1 \left(\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{2} + 1} k_2 - \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{2} + 1} k_2 \right) = 0. \quad (44)$$

Показано выполнение закона симметрии отражения для длинных волн, проходящих интерфейс последовательно.

Далее рассматривается одновременное прохождение возмущений. Опираясь на формулы для перемещений и скоростей, введенные ранее, можно записать следующее:

$$\begin{cases} u_0 = A_1 [\cos(-\omega_1 t) - 1] - A_1^{\text{отп}} [\cos(-\omega_1 t) - 1] + A_2^* [\cos(-\omega_1^* t) - 1], \\ v_0 = \omega_1 A_1 \sin(-\omega_1 t) + \omega_1 A_1^{\text{отп}} \sin(-\omega_1 t) - \omega_1^* A_2^* \sin(-\omega_1^* t), \\ u_1 = A_2 [\cos(k_2 - \omega_2 t) - 1] + A_2^{\text{отп}} [\cos(k_2 - \omega_2 t) - 1] + A_1^* [\cos(k_1^* - \omega_2^* t) - 1], \\ v_1 = -\omega_2 A_2 \sin(k_2 - \omega_2 t) + \omega_2 A_2^{\text{отп}} \sin(k_2 - \omega_2 t) + \omega_2^* A_1^* \sin(k_1^* - \omega_2^* t), \end{cases} \quad (45)$$

где $\omega_1^* = \omega_1(k_2^*)$, $\omega_2^* = \omega_2(k_1^*)$.

Необходимо сделать акцент на фазе гармонической функции. Из того, что:

$$\omega_1 = \omega_2^*, \quad \omega_2 = \omega_1^*, \quad (46)$$

уникальными остаются только ω_1, ω_2 , причем $\omega_1 = \sqrt{2}\omega_2$.

Тогда выражение для мощности на границе примет вид (опущены слагаемые, которые дадут 0 при интегрировании):

$$\begin{aligned} \eta = & \frac{C}{2} [A_1^* \omega_2 [A_2^{\text{отп}} - A_2] \sin(k_2 - \omega_2 t) \cos(k_1^* - \sqrt{2}\omega_2 t) - \\ & - \omega_2 [A_2^{\text{отп}} - A_2] [A_1 - A_1^{\text{отп}}] \sin(k_2 - \omega_2 t) \cos(-\sqrt{2}\omega_2 t) - \\ & - A_2^* \omega_2 [A_2^{\text{отп}} - A_2] \sin(k_2 - \omega_2 t) \cos(-\omega_2 t) + \\ & + \sqrt{2}\omega_2 A_1^* [A_2^{\text{отп}} + A_2] \sin(k_1^* - \sqrt{2}\omega_2 t) \cos(k_2 - \omega_2 t)] - \\ & - \sqrt{2}\omega_2 A_1^* [A_2^{\text{отп}} + A_2] \sin(k_1^* - \sqrt{2}\omega_2 t) + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +\sqrt{2}\omega_2(A_1^*)^2\frac{1}{2}\sin(2k_1^* - 2\sqrt{2}\omega_2t) - \sqrt{2}\omega_2(A_1^*)^2\sin(k_1^* - \sqrt{2}\omega_2t) - \\
& -\sqrt{2}\omega_2A_1^*[A_1 - A_1^{\text{отп}}]\sin(k_1^* - \sqrt{2}\omega_2t)\cos(-\sqrt{2}\omega_2t) + \\
& +\sqrt{2}\omega_2A_1^*[A_1 - A_1^{\text{отп}}]\sin(k_1^* - \sqrt{2}\omega_2t) - \\
& -\sqrt{2}\omega_2A_1^*A_2^*\sin(k_1^* - \sqrt{2}\omega_2t)\cos(-\omega_2t) + \\
& +\sqrt{2}\omega_2A_1^*A_2^*\sin(k_1^* - \sqrt{2}\omega_2t) + \\
& +\sqrt{2}\omega_2[A_2^{\text{отп}} - A_2]\sin(-\sqrt{2}\omega_2t)[A_2 + A_2^{\text{отп}}]\cos(k_2 - \omega_2t) - \\
& -\sqrt{2}\omega_2[A_2^{\text{отп}} - A_2][A_2 + A_2^{\text{отп}}]\sin(-\sqrt{2}\omega_2t) + \\
& +\sqrt{2}\omega_2[A_2^{\text{отп}} - A_2]A_1^*\sin(-\sqrt{2}\omega_2t)\cos(k_1^* - \sqrt{2}\omega_2t) - \\
& -\sqrt{2}\omega_2[A_2^{\text{отп}} - A_2]A_1^*\sin(-\sqrt{2}\omega_2t) - \\
& -\sqrt{2}\omega_2[A_2^{\text{отп}} - A_2][A_1 - A_1^{\text{отп}}]\sin(-\sqrt{2}\omega_2t)\cos(-\sqrt{2}\omega_2t) + \\
& +\sqrt{2}\omega_2[A_2^{\text{отп}} - A_2][A_1 - A_1^{\text{отп}}]\sin(-\sqrt{2}\omega_2t) - \\
& -\sqrt{2}\omega_2[A_2^{\text{отп}} - A_2]A_2^*\sin(-\sqrt{2}\omega_2t)\cos(-\omega_2t) + \\
& +\sqrt{2}\omega_2[A_2^{\text{отп}} - A_2]A_2^*\sin(-\sqrt{2}\omega_2t) - \\
& -\omega_2A_2^*[A_2^{\text{отп}} + A_2]\sin(-\omega_2t)\cos(k_2 - \omega_2t) - \\
& -\omega_2A_2^*A_1^*\sin(-\omega_2t)\cos(k_1^* - \sqrt{2}\omega_2t) + \\
& +\omega_2A_2^*[A_1 - A_1^{\text{отп}}]\sin(-\omega_2t)\cos(-\sqrt{2}\omega_2t)
\end{aligned}$$

Интегрирование осциллирующих частей:

$$\begin{aligned}
& \int_0^{T_2^*} [\sin(k_2 - \omega_2t)\cos(k_1^* - \sqrt{2}\omega_2t)]dt = \\
& = [\sqrt{2}\sin(k_2)\cos(k_1^*)\sin(2\sqrt{2}\pi) - \cos(k_2)\cos(k_1^*)[\cos 2\sqrt{2}\pi - 1] + \\
& + \sin(k_2)\sin(k_1^*)\sqrt{2}[\cos 2\sqrt{2}\pi - 1] - \cos k_2\sin(k_1^*)\sin 2\sqrt{2}\pi], \\
& \int_0^{T_2^*} \sin k_2 - \omega_2t \cos \sqrt{2}\omega_2t dt = \\
& = \sqrt{2} \sin k_2 \sin(2\sqrt{2}\pi) - \cos k_2 [\cos(2\sqrt{2}\pi) - 1], \\
& \int_0^{T_2^*} \sin(k_1^* - \sqrt{2}\omega_2t) dt = \cos k_1^* \frac{\cos(2\sqrt{2}\pi) - 1}{\sqrt{2}} + \sin k_1^* \frac{\sin(2\sqrt{2}\pi)}{\sqrt{2}}, \\
& \int_0^{T_2^*} \sin(-\sqrt{2}\omega_2t) \cos -\sqrt{2}\omega_2t dt = \frac{\cos^2(2\sqrt{2}\pi) - 1}{2\sqrt{2}}, \\
& \int_0^{T_2^*} \sin(-\sqrt{2}\omega_2t) \cos(k_2 - \omega_2t) = \sqrt{2} \cos(k_2) [\cos(2\sqrt{2}\pi) - 1] - \\
& - \sin k_2 \sin(2\sqrt{2}\pi),
\end{aligned}$$

$$\int_0^{T_2^*} \sin -\omega_2 t \cos (-\sqrt{2}\omega_2 t) dt = 1 - \cos (2\sqrt{2}\pi),$$

После интегрирования, с учетом равенства амплитуд и волновых чисел начальных возмущений ($A_1 = A_2, k_1 = k_2$), а также выражения для волновых чисел прошедших волн (принимая, что $k_1^* = \sqrt{2}k_2$) и выражения для их амплитуд ($A_2^* = \sqrt{2}A_1^*$), использованного в формуле (39), в предположении, что $k_2 \rightarrow 0$ (длинные волны), получается:

$$\begin{aligned} \langle \eta \rangle = & \frac{C}{2} \omega_2 [-2A_2^2 \cos^2(\sqrt{2}\pi) + 6A_2^2 - 4A_2 * A_1^{\text{отр}} + \\ & + 2A_2 A_1^{\text{отр}} \cos^2(\sqrt{2}\pi) - 4A_2 A_2^{\text{отр}} + 2A_2 A_2^{\text{отр}} \cos^2(\sqrt{2}\pi) - 8A_2 A_1^* + \\ & + 4A_2 A_1^* \cos^2(\sqrt{2}\pi) - 2A_1^{\text{отр}} A_2^{\text{отр}} \cos^2(\sqrt{2}\pi) + 4A_1^{\text{отр}} A_2^{\text{отр}} - \sqrt{2}A_1^{\text{отр}} A_1^* - \\ & - 2A_1^{\text{отр}} A_1^* \cos^2(\sqrt{2}\pi) - 2(A_2^{\text{отр}})^2 - 2A_2^{\text{отр}} A_1^* \cos^2(\sqrt{2}\pi) + 3\sqrt{2}A_2^{\text{отр}} A_1^* - \\ & - 2(A_1^*)^2 \cos^2(\sqrt{2}\pi) + \sqrt{2}(A_1^*)^2] \sin^2(\sqrt{2}\pi) \end{aligned} \quad (47)$$

При подстановке значений для амплитуд, полученных из континуальной подстановки, выраженных через амплитуду исходной волны (A_2), получается выражение:

$$\langle \eta \rangle = C A_2^2 \sin^2(\sqrt{2}\pi) [6\sqrt{2} - 8]. \quad (48)$$

Интеграл получился не равным нулю. Это означает, что из одной среды перетекло больше энергии, чем вытекло из другой. Таким образом, было показано, что при одновременном прохождении волн через интерфейс закон симметрии отражения не выполняется.

2 ГЛАВА 2. ПОСТАНОВКА ОДНОМЕРНОЙ НЕЛИНЕЙНОЙ ЗАДАЧИ ПРОХОЖДЕНИЯ ВОЛНЫ

2.1 Описание механической модели кристаллической решетки

Рассматривается обобщенное уравнение динамики частиц:

$$m_n \ddot{u}_n = F_{n+\frac{1}{2}}^* - F_{n-\frac{1}{2}}^*, \quad (49)$$

где $F_n^* = F_n^*(\epsilon_n)$ - обобщенная сила, $\epsilon_n = u_{n+\frac{1}{2}} - u_{n-\frac{1}{2}}$ - относительное смещение двух элементов модели.

Функция F_n^* может быть разложена по формуле Тейлора:

$$F_n^*(\epsilon_n) = C[\epsilon_n + \alpha^* \epsilon_n^2 + \beta^* \epsilon_n^3 + \dots], \quad (50)$$

где α^*, β^* - коэффициенты разложения.

Оставляются слагаемые вплоть до квадратичного. Тогда уравнение (49) примет вид:

$$\ddot{u}_n = \omega_*^2 (u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1})(1 + \alpha^*(u_{n+1} + u_{n-1})), \quad (51)$$

где $\omega_* = \sqrt{\frac{C}{m_n}}$.

Для составной системы, представленной на рис. 1, в нелинейной случае уравнения динамики запишутся в виде:

$$\begin{cases} \ddot{u}_n = \omega_1^2 (u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1})(1 + \alpha^*(u_{n+1} + u_{n-1})), & n = 1, 2, 3, \dots, \frac{N}{2} \\ \ddot{u}_n = \omega_2^2 (u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1})(1 + \alpha^*(u_{n+1} + u_{n-1})), & n = \frac{N}{2} + 1, \dots, N \end{cases}$$

$$\omega_1 = \sqrt{\frac{C}{m_1}}, \quad \omega_2 = \sqrt{\frac{C}{m_2}}, \quad (52)$$

где α^* - коэффициент нелинейности.

Рассматривается замкнутая система, поэтому задаются периодические граничные условия.

2.2 Локализованное возмущение. Неравновесное состояние

Ввиду слабой нелинейности (малость коэффициента α^*), для задания локализованного в пространстве возмущения используются формулы (3).

Далее ставится численный эксперимент для исследования энергии в системе. Под мониторингом находится величина относительной разницы энергий.

Результаты численного моделирования и сравнение с линейной моделью ($\alpha^* = 0$):

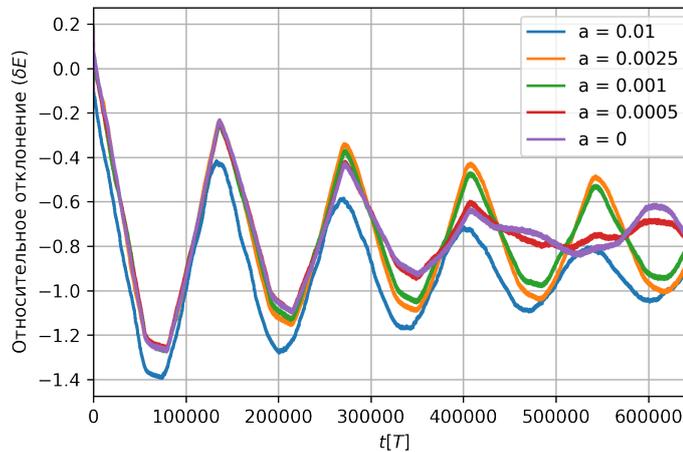


Рис. 11: Неравновесное состояние. Сравнение результатов для разных α^*

На рис. 11 рассмотрено неравновесное состояние, варьируется значение коэффициента нелинейности. В реализации используются те же соображения, что и в линейном случае (15,16). Задается двусторонний поток возмущений в двух частях замкнутой системы. Колебания энергии больше в нелинейном случае, но линейной зависимости амплитуды колебаний графика от коэффициента α^* не наблюдается. В нелинейном случае происходит слабое взаимодействие возмущений друг с другом – они обмениваются энергиями.

3 ГЛАВА 3. ПОСТАНОВКА ДВУМЕРНОЙ ЛИНЕЙНОЙ ЗАДАЧИ ПРОХОЖДЕНИЯ ВОЛНЫ

3.1 Уравнения динамики. Энергия системы

В данном разделе рассматриваются поперечные колебания в линейной двумерной механической модели кристаллической решетки. Формулы динамики заимствованы из [19]. Модель представлена на рис. 12 и состоит из (N, N) частиц. Имеются точечные массы, соединенные линейными пружинками. Индексы (i, j) находятся в промежутке $1 \leq i, j \leq N$.

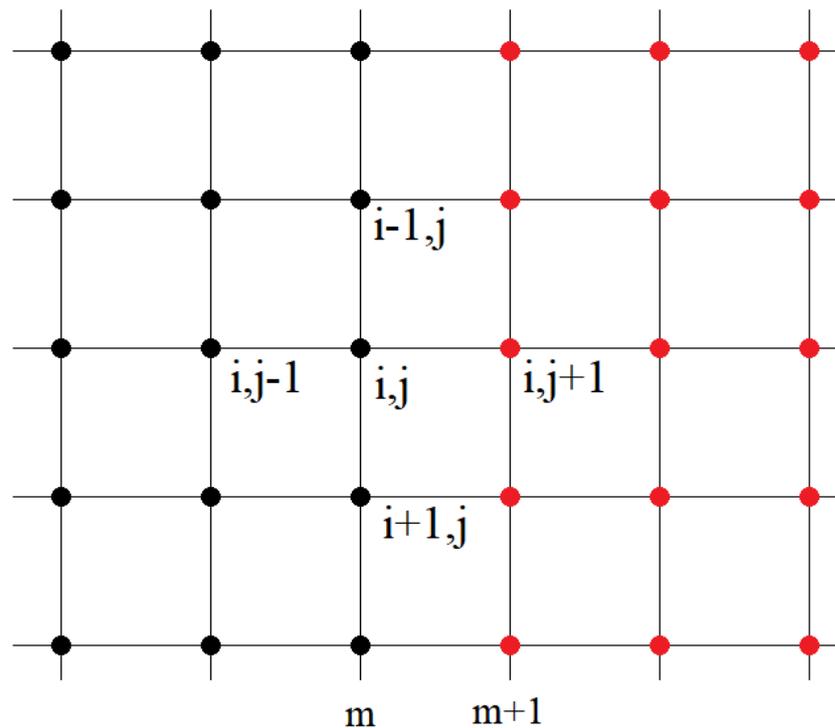


Рис. 12: Схематическое изображение двумерной модели

Дифференциальные уравнения имеют вид:

$$\begin{cases} \frac{d^2 u_{i,j}}{dt^2} = \frac{C_1}{m_1} (u_{i+1,j} + u_{i-1,j} + u_{i,j-1} + u_{i,j+1} - 4u_{i,j}), & j \leq m, \\ \frac{d^2 u_{i,j}}{dt^2} = \frac{C_2}{m_2} (u_{i+1,j} + u_{i-1,j} + u_{i,j+1} - 3u_{i,j}) + \frac{C_1}{m_1} (u_{i,j-1} - u_{i,j}), & j = m + 1, \\ \frac{d^2 u_{i,j}}{dt^2} = \frac{C_2}{m_2} (u_{i+1,j} + u_{i-1,j} + u_{i,j-1} + u_{i,j+1} - 4u_{i,j}), & m + 1 < j \leq N, \end{cases} \quad (53)$$

где C_1, C_2 – жесткости пружинок в двух средах соответственно, m_1, m_2 – точечные массы, m – индекс, соответствующий частицам на интерфейсе.

Нас интересует распределение энергии, формула для которой имеет вид:

$$E_{i,j} = \frac{m_{i,j}v_{i,j}^2}{2} + \frac{C_1^*}{4}(u_{i,j-1} - u_{i,j})^2 + \frac{C_2^*}{4}(u_{i+1,j} - u_{i,j})^2 + \frac{C_3^*}{4}(u_{i-1,j} - u_{i,j})^2 + \frac{C_4^*}{4}(u_{i,j+1} - u_{i,j})^2, \quad (54)$$

где $E_{i,j}$ – полная энергия одной частицы.

$$\begin{cases} C_1^* = C_2^* = C_3^* = C_4^* = C_1, & j \leq m, \\ C_1^* = C_2^* = C_3^* = C_1, & C_4^* = C_2, & j = m + 1, \\ C_1^* = C_2^* = C_3^* = C_4^* = C_2, & m + 1 < j \leq N. \end{cases} \quad (55)$$

Тогда энергии двух разных по свойствам частей системы запишутся как:

$$E_1 = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^m E_{i,j}, \quad E_2 = \sum_{i=1}^N \sum_{j=m+1}^N E_{i,j}, \quad E = E_1 + E_2, \quad (56)$$

где E_1, E_2, E – энергия первой части, второй и всей системы соответственно.

Для удобства сравнения результатов перехода волны через интерфейс вводятся коэффициенты прохождения и отражения, аналогично (6):

$$K_1 = \frac{E_1}{E}, \quad K_2 = \frac{E_2}{E} = 1 - K_1, \quad (57)$$

где K_1, K_2 – коэффициенты отражения и прохождения соответственно.

3.2 Локализованное возмущение. Начальные условия

Предполагается, что возмущение задается в среде 1 (C_1, m_1). Начальные условия, соответствующие локализованной в пространстве волне будут иметь вид:

$$u_{i,j}^0 = W(\mathbf{r})\sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}), \quad \dot{u}_{i,j}^0 = v_{i,j} = -\omega W(\mathbf{r})\cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}), \quad (58)$$

где $\omega = 2\sqrt{\frac{C_1}{m_1}}\sqrt{\sin^2(\frac{q_x}{2}) + \sin^2(\frac{q_y}{2})}$ – частота, удовлетворяющая дисперсионному соотношению. $\mathbf{q} = a\mathbf{k}$ – безразмерный волновой вектор, a – равновесное расстояние, $q_x = \mathbf{q} \cdot \mathbf{e}_1, q_y = \mathbf{q} \cdot \mathbf{e}_2$, где $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$ – базисные векторы в заданной системе координат, $W(\mathbf{r}) = \cos^2(\frac{\pi r}{D})$ – огибающая, $r = |\mathbf{r}|$ – модуль радиус вектора, D – диаметр возмущения.

Радиус вектор, записанный через базисные векторы:

$$\mathbf{r} = aie_1 + aj\mathbf{e}_2. \quad (59)$$

Ориентация системы координат представлена на рис. 13.

3.3 Исследование угла преломления траектории возмущения

В данном разделе исследуется угол отражения и преломления набегающего на интерфейс возмущения (рис. 13). Угол отражения (β) – угол между волновым вектором отраженного возмущения и нормалью к интерфейсу, лежащей в плоскости и направленной в сторону первой среды. Угол преломления (γ) – угол между волновым вектором прошедшего возмущения и нормалью, направленной в сторону второй среды. Рассматривается возмущение диаметром 150 частиц, с волновым вектором таким, что $N_x = N_y = 35a$, где N_x, N_y - длины волн в частицах. В связи с этим, возмущение будет двигаться под углом $\alpha = 45^\circ$ (угол падения). Варьируются жесткости и массы во второй части системы (C_2, m_2).

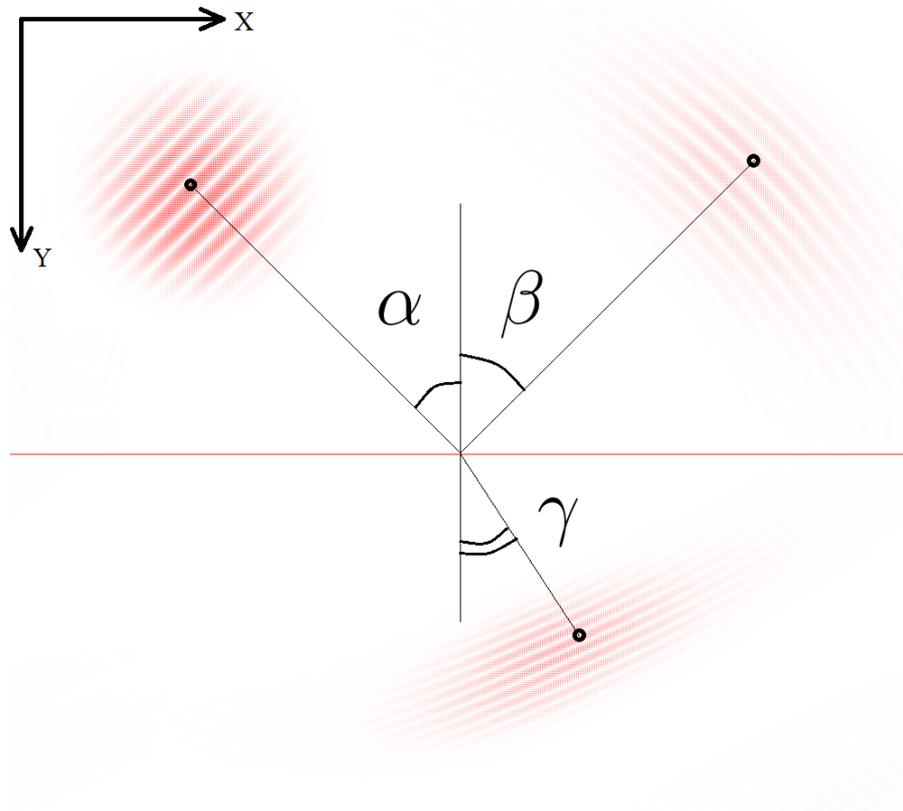


Рис. 13: Изображение падающего, отраженного и прошедшего возмущения. Черные окружности – энергетические центры возмущений. Красным цветом отложены перемещения в плоскости решетки для возможности 2D-визуализации.

Результаты численного моделирования представлены в таблице 1.

Отношение масс	$\tan(\alpha)$	$\sin(\alpha)/\sin(\gamma)$	c_2/c_1
1/3	0.46	0.58	0.58
1/2	0.58	0.71	0.71
1/1.5	0.71	0.82	0.82

Таблица 1: Результаты численного моделирования преломления траектории энергетического центра возмущения при переходе через раздел сред

Как можно заметить, по аналогии с оптикой, работает закон преломления, в котором отношение синусов падающего и преломленного луча равняется отношению коэффициентов преломления, которые, в свою очередь, выражаются через скорость распространения света в данной среде и в вакууме.

Ниже приводятся результаты численных экспериментов, где менялась не только масса второй среды, но и жесткость пружин. Результаты приведены в таблице 2:

c_2/c_1	$\sin(\alpha)/\sin(\gamma)$	$\tan(\alpha)$
0.63	0.64	0.51
0.54	0.55	0.44
0.44	0.46	0.36

Таблица 2: Результаты для численных экспериментов с варьированием жесткостей и масс пружин

Далее рассматривается энергетический импульс в системе, заданной уравнениями (53).

3.4 Импульс энергии

Вводится понятие импульса энергии:

$$h = v_c E, \quad v_c = \sqrt{v_{cx}^2 + v_{cy}^2} \quad (60)$$

где h – импульс волны, v_c – скорость движения энергетического центра (ЭЦ) возмущения, E – энергия, v_{cx} , v_{cy} – проекции скорости ЭЦ на орты \mathbf{e}_1 и \mathbf{e}_2 . Полная энергия вычисляется по формулам (56).

Рассматривается энергетический импульс двух частей составной среды:

$$h_1 = v_{c_1} E_1, \quad h_2 = v_{c_2} E_2, \quad (61)$$

где h_1 , h_2 – импульсы первой и второй части соответственно.

Вводится величина, характеризующая суммарный импульс системы после прохождения интерфейса:

$$\tilde{k} = \frac{|h_1| + |h_2|}{h_0}, \quad (62)$$

где h_0 – энергетический импульс начального возмущения.

Далее приводятся полученные в результате численного моделирования значения для \tilde{k} при прохождении локализованного возмущения через интерфейс (таблица 3):

Отн. масс	1/1.03	1/1.08	1/1.5	1/1.75	1/2	1/2.5	1/3	1/3.5
\tilde{k}	0.9733	0.9285	0.6858	0.6031	0.5441	0.4732	0.4290	0.4057

Таблица 3: Значения \tilde{k} для разных значений отношения масс в двух средах

Сравнение результатов моделирования из табл. 3 с результатами, полученными для одномерной модели, заданной уравнениями (1):

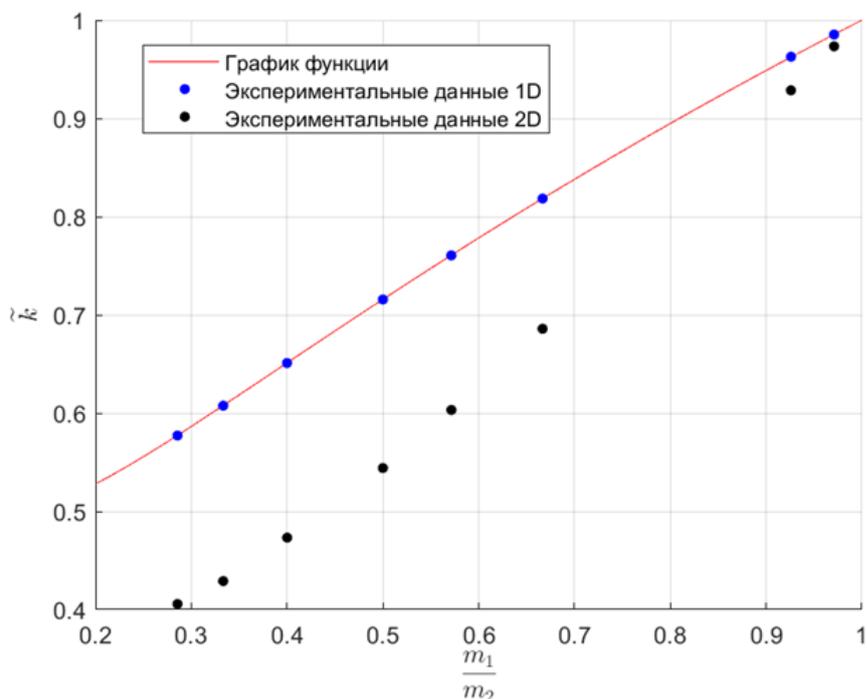


Рис. 14: Сравнение результатов вычисления \tilde{k} . Непрерывный график функции – аналитическая формула для одномерной модели

Из рис. 14 и табл. 3 можно сделать вывод: чем сильнее отличаются массы, тем больше энергетического импульса теряется при переходе из одной среды в другую. В двумерной модели наблюдается большее несохранение импульса.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе был рассмотрен перенос энергии механических колебаний в одномерной линейной и нелинейной, а также двумерной модели.

В одномерном случае численно посчитан коэффициент прохождения и произведено сравнение с аналитикой. Введена модель, которая полностью описывает поведение энергии в континуальном случае. Численно и аналитически показано различие между данной и дискретной моделью: закон симметрии отражения не выполняется в дискретном случае. Рассмотрено равновесное и неравновесное состояние.

В нелинейном случае были показаны отличие эволюции неравновесного состояния от наблюдаемой картины в линейной системе.

Для двумерной модели вычислен угол преломления набегающего возмущения после прохождения границы, произведена численная оценка величины энергетического импульса в данной системе.

В рамках выполнения работы были написаны несколько программ, позволяющих проводить все численные эксперименты, представленные в данной работе. Некоторые из них представлены в открытом доступе.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ivchenko E. L., Pikus G. E. Superlattices and other heterostructures: symmetry and optical phenomena, 1997, p. 34-36.
2. Кривцов. А.М. Прохождение возмущения через границу: континуальное описание. В печати.
3. Капица П. Л. Исследование механизма теплопередачи в гелии II. Журнал экспериментальной и теоретической физики. 1941. Т. 11. Вып. 1, с. 2-4.
4. Хвесьюк В.И. Перенос теплоты в наноструктурах. Инженерный журнал: наука и инновации, 2013, вып. 5, с. 1-2.
5. Bachmann M., Czerner M., Edalati-Boostan S. and Heiliger C. Atomistic Green's Function Method supported by ab initio Calculations : Application to phonon transport in ZnO and ZnS. Physikalisches Institut, Justus-Liebig-Universit"at Giessen, Germany, 2011. p. 1-2.
6. Baimova J.A., Bessonov N.M., Krivtsov A.M., Motion of localized disturbances in scalar harmonic square lattice. Phys. Rev. E, 2023, p. 4-7.
7. Balandin A.A. Chill out: new materials and designs can keep chips cool IEEE Spectr, 2009, p. 29–33.
8. Balandin A.A. Phonons and thermal transport in graphene and graphene-based materials. Reports on Progress in Physics 80(3), 2016, p. 5-8.
9. Balandin A.A. The heat is on: graphene applications. IEEE Nanotechnol. Mag. 5 15–9., 2011, p. 4.
10. Khvesyuk1 V.I., Liu B., Barinov A.A. Development of acoustic and diffuse mismatch models for predicting the Kapitza resistance. Journal of Physics: Conference Series, 2019, p. 1-2.
11. Krivtsov A.M. Dynamics of matter and energy. Zeitschrift fur Angewandte Mathematik und Mechanik, 2022, p. 4-6.
12. Krivtsov A.M. Kuzkin V.A. Discrete and continuum thermomechanics. 2018, Encyclopedia of Continuum Mechanics, p. 3.

13. Kuzkin V. A. Acoustic transparency of the chain-chain interface. In press, p. 3-8.
14. Maria L. Coherent Phonon Heat Conduction in Superlattices. *Science* 338(6109):936-9., 2012, p. 1-3.
15. Matukumilli V. D. and Bhattacharya B. Phonon wave-packet scattering and energy dissipation dynamics in carbon nanotubeoscillators. *Journal of Applied Physics* 118, 244906 (2015); doi: 10.1063/1.4939277, p. 2.
16. Spohn, H.: The phonon Boltzmann equation, properties and link to weakly anharmonic lattice dynamics. *J. Stat. Phys.* – 2006. – p. 23.
17. Steinbrochel C. The scattering of phonons of arbitrary wavelength at a solid-solid interface: Model calculation and applications. *Zeitschrift fur Physik B Condensed Matter*, 1976, p. 3-8.
18. Verhulst F. High–low frequency interaction in alternating FPU a-chains. *International Journal of Non-Linear Mechanics* 131(2):103686, 2021, p.1-2.
19. Zhao H., Freund J. B., Lattice-dynamical calculation of phonon scattering at ideal Si–Ge interfaces. *Journal of Applied Physics* 97, 024903 (2005), p. 1-3.