

Министерство образования и науки Российской Федерации

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ ПЕТРА ВЕЛИКОГО

ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ МАШИНОВЕДЕНИЯ
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

A. M. Кривцов B. A. Кузькин

МЕХАНИКА
ДИСКРЕТНЫХ СРЕД

ПЕРЕХОДНЫЕ ТЕПЛОВЫЕ ПРОЦЕССЫ
В ГАРМОНИЧЕСКИХ КРИСТАЛАХ

Учебное пособие



Санкт-Петербург
2017

Министерство образования и науки Российской Федерации

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ ПЕТРА ВЕЛИКОГО

ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ МАШИНОВЕДЕНИЯ
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

A. M. Крициов B. A. Кузькин

МЕХАНИКА
ДИСКРЕТНЫХ СРЕД

ПЕРЕХОДНЫЕ ТЕПЛОВЫЕ ПРОЦЕССЫ
В ГАРМОНИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛАХ

*Рекомендовано федеральным учебно-методическим обединением в
системе высшего образования по укрупненным группам специальностей и
направлений подготовки 15.00.00 “Машиностроение” в качестве учебного
пособия для реализации основных профессиональных программ высшего
образования по направлению подготовки магистратуры 15.04.33
“Прикладная механика”*



Санкт-Петербург
2017

УДК 531.3(075.8)
K82

Р е ц е н з е н т ы:

Доктор физико-математических наук,
ведущий научный сотрудник Института проблем машиноведения РАН
E. A. Иванова

Доктор физико-математических наук,
заведующий лабораторией микромеханики материалов Института проблем
машиноведения РАН *A. B. Порубов*

Кривцов А.М. Механика дискретных сред. Переходные тепловые процессы в гармонических кристаллах : учеб. пособие / А. М. Кривцов, В. А. Кузькин. — СПб. : Изд-во Политехн. ун-та, 2017. — 90 с.

Соответствует содержанию федеральной дисциплины базового цикла М2 “Современные проблемы механики” государственного образовательного стандарта по направлению подготовки магистров 01.04.03 “Механика и математическое моделирование”.

Пособие посвящено описанию быстрых и медленных тепловых процессов в гармонических кристаллах. К быстрым процессам относятся выравнивание кинетической и потенциальной энергий и перераспределение энергии по пространственным направлениям, к медленным — процесс распространения тепла. Изложен оригинальный подход, позволяющий описывать данные процессы аналитически.

Предназначено для студентов, изучающих теоретическую механику, механику сплошной среды, статистическую физику и физику твердого тела, а также для аспирантов, научных работников и инженеров.

Ил. 9. Библиогр.: 48 назв.

Печатается по решению
Совета по издательской деятельности Ученого совета
Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

ISBN 978-5-7422-5602-1

© Кривцов А. М., Кузькин В. А., 2017
© Санкт-Петербургский политехнический
университет Петра Великого, 2017

Оглавление

Введение	6
Глава 1. Тепловые процессы в одномерных гармонических кристаллах	11
1.1. Уравнения динамики кристалла	11
1.2. Случайные и детерминированные величины	13
1.3. Уравнения динамики ковариаций	14
1.4. Однородное состояние	17
1.5. Стационарное однородное состояние	19
1.6. Обобщенные энергии	23
1.7. Смешанные ковариации	25
1.8. Континализация	26
1.9. Быстрые и медленные процессы	27
1.10. Динамика быстрых процессов	29
1.11. Динамика медленных процессов	34
1.12. Распространение тепла в свободном кристалле	36
1.13. Выводы	41
Глава 2. Быстрые тепловые процессы в гармонических кристаллах простой структуры	44
2.1. Уравнения динамики кристалла	45

2.2. Случайные и детерминированные величины	46
2.3. Уравнения динамики ковариаций	47
2.4. Обобщенные энергии	49
2.5. Стационарное состояние	51
2.6. Переход к стационарному состоянию	53
2.7. Квадратная решетка	54
2.8. Треугольная решетка	57
2.8.1. Общие соотношения	57
2.8.2. Стационарное состояние. Тензорная температура	58
2.8.3. Перераспределение энергии по пространственным направлениям	62
2.8.4. Выравнивание кинетической и потенциальной энергий	64
2.8.5. Вычисление ковариации перемещений в задачах отепловом расширении	68
2.9. Влияние нелинейности	69
2.10. Выводы	71
Заключение	74
Библиографический список	76
Приложения	81
Приложение 1. Дифференцирование ковариаций	82
Приложение 2. Переход от позиционного к пространственно-корреляционному описанию	85

Приложение 3. Дополнительные разделы дискретного описания динамики кристалла	89
Приложение 4. Колебания треугольной решетки	91

Введение

С развитием нанотехнологий появляется возможность создания сверхчистых кристаллических материалов, на 100 % свободных от дефектов и примесей. Физические свойства подобных материалов уникальны и могут принципиально отличаться от свойств обычных материалов. Хорошо известно, что прочность сверхчистых материалов на несколько порядков превосходит прочность материалов, содержащих дефекты [1]. Менее широко известны, но не менее интересны для практических приложений уникальные тепловые свойства сверхчистых материалов. Так, в подобных материалах реализуется баллистический, недиффузионный способ распространения тепла, что приводит к тепловой сверхпроводимости [2–4].

Удобной моделью для исследования термомеханических свойств сверхчистых материалов является гармонический кристалл — совокупность материальных точек, упорядоченных в идеальную кристаллическую решетку и взаимодействующих посредством линеаризованных (гармонических) сил. Для наглядности такие силы часто изображают линейными пружинками, однако эта интерпретация верна только в одномерном случае¹. Протекание тепловых процессов в гармонических кристаллах существенно отличается от той картины, которую дает классическая термодинамика [5–7]. Во-первых, в силу линейности системы высокочастотные тепловые и низкочастотные механические движения оказываются независимыми, что позволяет изучать тепловые процессы отдельно, без возмущений, связанных с ме-

¹ В многомерном случае повороты пружин вносят нелинейность в систему.

ническим движением. Во-вторых, распространение тепла носит баллистический, недиффузионный характер — фактически реализуется тепловая сверхпроводимость. Возникающие тепловые волны нестационарны и характеризуются достаточно сложной динамикой [8, 9].

Несомненным преимуществом линейной системы является возможность ее аналитического описания. Кроме того, современные исследования распространения тепла в низкоразмерных nanoструктурах демонстрируют аномальное распространение тепла [2–4], которое в первом приближении может описываться на основе модели гармонического кристалла. Описание тепловых процессов в кристаллических структурах при малой нелинейности также может существенно опираться на результаты, полученные для гармонических систем.

Распространение тепла в одномерных гармонических кристаллах рассматривалось давно как аналитически, так и численно. Так, в [10–12] решалась задача передачи тепла от горячей части кристалла к холодной, в [13, 14] — задача о колебаниях синусоидального теплового возмущения в кристалле. В ряде работ использовался тот факт, что уравнения динамики частиц кристалла допускают аналитическое решение [14–16]. Статистическая обработка этого решения позволяет получить любую информацию о тепловых процессах в кристалле. Однако такой способ приводит к громоздким выражениям, которые не всегда удается привести к обозримым формулам. Кроме того, этот способ не распространяется на нелинейные системы, для которых аналитическое решение недоступно. В других публикациях [5, 6] статистические характеристики получали на основе дифференциальных уравнений динамики кристалла, однако в большинстве работ рассматривалось стационарное состояние, в котором указанные характеристики не зависят от времени. Более детальный литературный обзор дан в [9], за подробной информацией можно обратиться к обзорным статьям [17–19].

В двухмерных и трехмерных кристаллах большой интерес также представляют процессы, происходящие при переходе к состоянию термодинамического равновесия [20, 21]. Неравновесное состояние может быть вызвано, например, прохождением ударных волн [22–25] или быстрым лазерным воздействием [26–30]. В таких случаях кинетические энергии теплового движения атомов в различных направлениях могут существенно отличаться [23–25]. Иными словами, кинетическая температура может проявлять тензорные свойства. В частности, на фронте ударной волны, распространяющейся вдоль оси x , выполняются соотношения $T_{xx} > T_{yy}$, где $k_B T_{xx} = m \langle v_x^2 \rangle$; $k_B T_{yy} = m \langle v_y^2 \rangle$ (k_B — постоянная Больцмана). Кроме того, могут отличаться кинетическая и потенциальная энергии теплового движения атомов. Компьютерное моделирование [31] показывает, что при переходе к состоянию равновесия реализуется два процесса: 1) выравнивание кинетической и потенциальной энергий, 2) перераспределение кинетической энергии по пространственным направлениям.

В данном пособии изложен подход, предложенный в [8, 9, 32, 33] и позволяющий аналитически описывать тепловые процессы в одномерных, двухмерных и трехмерных гармонических кристаллах. Рассмотрено бесконечное множество (ансамбль) одинаковых гармонических кристаллов со случайными начальными условиями. Для описания поведения ансамбля введены ковариации (математические ожидания от произведения) скоростей и перемещений частиц. Выведены уравнения, описывающие динамику ковариаций. При этом начальные условия к данным уравнениям детерминированные. Процессы в системе разделяются на быстрые и медленные. К быстрым процессам относятся выравнивание кинетической и потенциальной энергий [33] и перераспределение энергии по пространственным направлениям [31]², к медленным — процессы распространения тепла [8, 9]. Уравнения

²Данный процесс присутствует только в двухмерных и трехмерных системах.

для медленных движений допускают континуализацию по пространственной координате, что позволяет, по крайней мере в одномерном случае, получить простое уравнение для кинетической температуры.

В первой главе пособия рассмотрены тепловые процессы в одномерных гармонических кристаллах. Сформулирована задача динамики для кристалла со случайными начальными условиями. Введены ковариации скоростей и перемещений частиц. Получены уравнения, описывающие динамику ковариаций, с детерминированными начальными условиями. Процессы в системе разделены на быстрые и медленные. Выведены уравнения, описывающие данные процессы. Определен закон, по которому происходит выравнивание кинетической и потенциальной энергий. Получено простое уравнение, описывающее распространение тепла в одномерном гармоническом кристалле.

Во второй главе пособия приведено обобщение излагаемого подхода на многомерный случай. Рассмотрены два быстрых тепловых процесса: 1) выравнивание кинетической и потенциальной энергий, 2) перераспределение энергии по пространственным направлениям. Выведены уравнения относительно ковариаций, описывающие данные процессы. Получены точные аналитические решения этих уравнений для квадратной и треугольной решеток. Выведена система уравнений, связывающая характеристики системы в стационарном состоянии с начальными условиями. Определены условия, при которых кинетическая температура проявляет тензорные свойства. Для проверки аналитических выкладок проведено сравнение с численным решением уравнений динамики решетки. Исследовано влияние малой нелинейности на полученные результаты.

Авторы благодарны всем, кто принимал участие в обсуждении данных исследований, особенно М. Б. Бабенкову, О. В. Гендельману, Е. А. Ивановой, Д. А. Индейцеву, М. Л. Качанову, С. А. Лурье, Н. Ф. Морозову, Е. А. Подольской, Э. А. Троппу,

В. Г. Хуверу, Д. В. Цветкову.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант N 17-71-10213.

Глава 1

Тепловые процессы в одномерных гармонических кристаллах

Рассмотрены тепловые процессы в одномерных гармонических кристаллах. Сформулирована задача динамики для кристалла со случайными начальными условиями. Введены ковариации скоростей и перемещений частиц. Получены уравнения, описывающие динамику ковариаций, с детерминированными начальными условиями. Процессы в системе разделены на быстрые и медленные. Выведены уравнения, описывающие данные процессы. Определен закон, по которому происходит выравнивание кинетической и потенциальной энергий. Получено простое уравнение, описывающее распространение тепла в одномерном гармоническом кристалле.

1.1. Уравнения динамики кристалла

Динамика частиц одномерного кристалла описывается уравнением

$$\ddot{u}_i = \mathcal{L}u_i, \quad (1.1)$$

где u_i — перемещение i -й частицы; индекс i принимает произвольные целые значения; \mathcal{L} — линейный разностный оператор. Очевидно, уравнению (1.1) удовлетворяет и $v_i = \dot{u}_i$ — скорость частицы: $\ddot{v}_i = \mathcal{L}v_i$. Будем считать, что оператор \mathcal{L} не зависит от i — номера частицы, то есть динамика всех частиц описывается одним уравнением.

В качестве примера рассмотрим оператор \mathcal{L} , соответствующий гармонической цепочке на упругом основании:

$$\mathcal{L} = \omega_0^2 \Delta^2 - \omega_1^2; \quad \omega_0 \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{C/m}; \quad \omega_1 \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{C_1/m}, \quad (1.2)$$

где m — масса частицы; C — жесткость связи между частицами; C_1 — жесткость упругого основания; Δ^2 — разностный оператор 2-го порядка,

$$\Delta^2 u_i \stackrel{\text{def}}{=} u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}. \quad (1.3)$$

Данная модель широко используется для исследования термо-механических процессов в дискретных системах [17–19]. Кроме того, она позволяет описывать тепловые процессы в низкоразмерных наноструктурах: свободных (при $C_1 = 0$) или находящихся на подложке ($C_1 \neq 0$).

Начальные условия для уравнения (1.1)

$$u_i = u_i^0; \quad \dot{u}_i = v_i^0, \quad (1.4)$$

где u_i^0, v_i^0 — начальные перемещения и скорости частиц.

Для описания теплового движения u_i^0 и v_i^0 удобно интерпретировать как случайные величины, которые более подробно рассмотрены в разделе 1.2.

Для задания граничных условий воспользуемся условиями Борна—Кармана (условиями периодичности):

$$u_{i+N} = u_i, \quad (1.5)$$

где N — фактическое число частиц в кристалле. Данная постановка может интерпретироваться как кристалл, замкнутый

в кольцо, радиус которого достаточно велик, чтобы искривленность кольца не влияла на динамику кристалла. Можно считать, что частицам кристалла соответствуют значения индекса $i = 0, 1, \dots, N - 1$. Тогда для записи уравнения (1.1) с оператором (1.2)–(1.3) потребуется дополнительно задание значений u_{-1} и u_N . Согласно условиям периодичности (1.4),

$$u_N = u_0; \quad u_{-1} = u_{N-1}. \quad (1.6)$$

Поскольку имеется в виду кристалл, рассмотрим поведение системы при больших значениях N и, особенно, случай $N \rightarrow \infty$.

1.2. Случайные и детерминированные величины

Рассмотрим бесконечное множество реализаций одного и того же кристалла. Реализации отличаются начальными значениями u_i^0, v_i^0 , представляющими собой случайные величины, статистические характеристики которых могут зависеть от i — номера частицы. Будем считать указанные величины центрированными:

$$\langle u_i^0 \rangle = 0; \quad \langle v_i^0 \rangle = 0. \quad (1.7)$$

Здесь и далее треугольными скобками обозначается математическое ожидание (предел среднего по множеству реализаций). Перемещения и скорости, полученные в результате решения уравнения движения (1.1) с начальными условиями u_i^0, v_i^0 , очевидно, также являются центрированными случайными величинами.

В качестве примера рассмотрим начальные условия, соответствующие мгновенному тепловому возмущению:

$$u_i^0 = 0; \quad v_i^0 = \sigma_i \rho_i, \quad (1.8)$$

где ρ_i — независимые случайные величины с нулевым математическим ожиданием и единичной дисперсией; σ_i — детерминированная девиация начальных скоростей.

Интересным с практической точки зрения является случай, когда σ_i — медленно изменяющаяся функция индекса i . Начальные условия (1.8) могут быть реализованы, например, в результате воздействия на кристалл ультракороткого лазерного импульса [29].

Для описания случайных процессов в подобных системах рассматриваются статистические характеристики случайных величин, являющиеся детерминированными функциями времени, например кинетическая температура частицы i , которая может быть определена через матожидание квадрата скорости:

$$k_B T_i \stackrel{\text{def}}{=} m \langle v_i^2 \rangle, \quad (1.9)$$

где k_B — постоянная Больцмана; m — масса частицы.

Однако для получения замкнутой системы уравнений дополнительно к кинетической температуре требуется рассмотрение ковариации¹ скоростей $\langle v_p v_q \rangle$ — величины, характеризующей движение пары частиц. На ее основе может быть введена нелокальная (ковариационная) температура [9], обобщающая понятие кинетической температуры.

1.3. Уравнения динамики ковариаций

Для вывода детерминированных уравнений динамики системы введем ковариации — перемещений, скоростей и смешанные:

$$\xi_{pq} \stackrel{\text{def}}{=} \langle u_p u_q \rangle; \quad \kappa_{pq} \stackrel{\text{def}}{=} \langle v_p v_q \rangle; \quad \nu_{pq} \stackrel{\text{def}}{=} \langle u_p v_q \rangle. \quad (1.10)$$

¹ Для центрированных случайных величин ковариация представляет собой матожидание их произведения.

Ковариация κ_{pq} при равенстве индексов дает $\langle v_p^2 \rangle$ — величину, пропорциональную кинетической температуре (1.9). Ковариации ξ_{pq} и κ_{pq} при перестановке индексов не меняются, а смешанная ковариация ν_{pq} может изменяться. Поэтому далее будем рассматривать симметричную и антисимметричную части смешанной ковариации:

$$\eta_{pq} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} (\nu_{pq} + \nu_{qp}); \quad \mu_{pq} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} (\nu_{pq} - \nu_{qp}). \quad (1.11)$$

Дифференцирование по времени соотношений (1.10) с учетом уравнений движения (1.1) дает замкнутую систему уравнений баланса для ковариаций

$$\dot{\xi}_{pq} = \nu_{pq} + \nu_{qp}; \quad \dot{\kappa}_{pq} = \mathcal{L}_p \nu_{pq} + \mathcal{L}_q \nu_{qp}; \quad \dot{\nu}_{pq} = \kappa_{pq} + \mathcal{L}_q \xi_{pq}, \quad (1.12)$$

где индекс при операторе \mathcal{L} — это индекс ковариации, на который действует оператор.

Так как ковариация ν_{pq} может меняться при перестановке индексов, то система (1.12) дополняется аналогичным уравнением для $\dot{\nu}_{qp}$.

Повторное дифференцирование позволяет исключить ν_{pq} , что приводит к системе

$$\ddot{\xi}_{pq} = (\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q) \xi_{pq} + 2\kappa_{pq}; \quad \ddot{\kappa}_{pq} = (\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q) \kappa_{pq} + 2\mathcal{L}_p \mathcal{L}_q \xi_{pq}. \quad (1.13)$$

Исключение κ_{pq} приводит к уравнению 4-го порядка для ξ_{pq} :

$$\dddot{\xi}_{pq} - 2(\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q) \ddot{\xi}_{pq} + (\mathcal{L}_p - \mathcal{L}_q)^2 \xi_{pq} = 0. \quad (1.14)$$

Уравнение (1.14) также можно записать в операторном виде:

$$\left(\mathcal{L}_t^2 - 2\mathcal{L}_t(\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q) + (\mathcal{L}_p - \mathcal{L}_q)^2 \right) \xi_{pq} = 0, \quad (1.15)$$

где $\mathcal{L}_t \xi \stackrel{\text{def}}{=} \ddot{\xi}$.

Впервые уравнение (1.15), по-видимому, было выведено в [32] (для частного случая свободной гармонической цепочки). После решения уравнения (1.15) остальные ковариации находят из соотношений, следующих из (1.12)–(1.13):

$$\kappa_{pq} = \frac{1}{2} (\mathcal{L}_t - \mathcal{L}_p - \mathcal{L}_q) \xi_{pq}; \quad \dot{\nu}_{pq} = \frac{1}{2} (\mathcal{L}_t - \mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q) \xi_{pq}. \quad (1.16)$$

Кроме того, соотношения (1.16) означают, что значения κ_{pq} и $\dot{\nu}_{pq}$ также удовлетворяют уравнению (1.15).

Отметим, что смешанные ковариации формально удовлетворяют замкнутому уравнению 2-го порядка:

$$\ddot{\nu}_{pq} = (\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q) \nu_{pq} + 2\mathcal{L}_q \nu_{qp}. \quad (1.17)$$

Однако уравнение (1.17) также можно рассматривать как систему двух связанных уравнений 2-го порядка для ковариаций ν_{pq} и ν_{qp} . Более подробно дифференцирование ковариаций рассмотрено в Приложение 1.

Начальные условия для ковариаций получают непосредственно из начальных условий (1.4):

$$\xi_{pq}^0 \stackrel{\text{def}}{=} \langle u_p^0 u_q^0 \rangle; \quad \kappa_{pq}^0 \stackrel{\text{def}}{=} \langle v_p^0 v_q^0 \rangle; \quad \nu_{pq}^0 \stackrel{\text{def}}{=} \langle u_p^0 v_q^0 \rangle. \quad (1.18)$$

Начальные условия (1.18) совместно с системой дифференциально-разностных уравнений (1.12) дают детерминированную начальную задачу для ковариаций. С помощью уравнений (1.12)–(1.13) легко получить начальные условия и для систем 2-го и 4-го порядков. Для последней, в частности, имеем

$$\begin{aligned} \dot{\xi}_{pq}^0 &= \nu_{pq}^0 + \nu_{qp}^0; & \ddot{\xi}_{pq}^0 &= (\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q) \xi_{pq}^0 + 2\kappa_{pq}^0; \\ \ddot{\xi}_{pq}^0 &= (3\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q) \nu_{pq}^0 + (\mathcal{L}_p + 3\mathcal{L}_q) \nu_{qp}^0. \end{aligned} \quad (1.19)$$

Таким образом, стохастическая начальная задача для перемещений частиц дает детерминированную начальную задачу для

ковариаций. Возможно использование различных вариантов замкнутых систем линейных уравнений 1-го (1.12), 2-го (1.13), (1.17) или 4-го (1.14) порядка. После решения начальной задачи кинетическая температура (1.9) частицы i может быть найдена как

$$k_B T_i = m \kappa_{pq} |_{p=q=i}. \quad (1.20)$$

Отметим, что таким образом температура может быть определена для любой частицы кристалла в любой момент времени для любых равновесных и неравновесных, стационарных и нестационарных процессов.

1.4. Однородное состояние

Рассмотрим пространственно-однородное состояние, при котором все статистические характеристики не зависят от пространственного расположения в цепочке. Тогда для величин, зависящих от позиционных индексов p, q , можно принять обозначения вида $\xi_{pq} = \xi_n$, где $n \stackrel{\text{def}}{=} q - p$ — корреляционный индекс, характеризующий разность координат. В 2.1 показано, что в пространственно-однородном состоянии $\mathcal{L}_p = \mathcal{L}_q = \mathcal{L}_n$. Тогда уравнения баланса (1.12) примут вид

$$\dot{\xi}_n = \nu_n + \nu_{-n}; \quad \dot{\kappa}_n = \mathcal{L}(\nu_n + \nu_{-n}); \quad \dot{\nu}_n = \kappa_n + \mathcal{L}\xi_n, \quad (1.21)$$

где $\mathcal{L} \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{L}_n$.

Из уравнений (1.21) следуют интегрируемые соотношения

$$\dot{\kappa}_n = \mathcal{L}\dot{\xi}_n; \quad \dot{\nu}_n = \dot{\nu}_{-n}. \quad (1.22)$$

Интегрирование приводит к законам сохранения:

$$\kappa_n - \mathcal{L}\xi_n = \epsilon_n^0; \quad \nu_n - \nu_{-n} = 2\mu_n^0, \quad (1.23)$$

где константы, находящиеся в правой части, определяются из начальных условий (они равны значениям левых частей при $t = 0$).

Отметим, что $\mu_{-n}^0 = -\mu_n^0$.

Повторное дифференцирование по времени уравнений (1.21) приводит к уравнениям

$$\ddot{\xi}_n = 2(\kappa_n + \mathcal{L}\xi_n); \quad \ddot{\kappa}_n = 2\mathcal{L}(\kappa_n + \mathcal{L}\xi_n); \quad \ddot{\nu}_n = 2\mathcal{L}(\nu_n + \nu_{-n}). \quad (1.24)$$

Используя законы сохранения (1.23), получают замкнутые уравнения для каждой из переменных:

$$\ddot{\xi}_n - 4\mathcal{L}\xi_n = 2\epsilon_n^0; \quad \ddot{\kappa}_n - 4\mathcal{L}\kappa_n = -2\mathcal{L}\epsilon_n^0; \quad \ddot{\nu}_n - 4\mathcal{L}\nu_n = 4\mu_{-n}^0. \quad (1.25)$$

Если для правых частей соотношений (1.24) ввести

$$\lambda_n \stackrel{\text{def}}{=} \kappa_n + \mathcal{L}\xi_n; \quad \eta_n \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2}(\nu_n + \nu_{-n}), \quad (1.26)$$

то выполняются уравнения, аналогичные (1.25), но однородные:

$$\ddot{\lambda}_n = 4\mathcal{L}\lambda_n; \quad \ddot{\eta}_n = 4\mathcal{L}\eta_n. \quad (1.27)$$

Уравнения (1.27), с точностью до числового множителя при \mathcal{L} , совпадают с исходным уравнением динамики кристалла (1.1).

После решения уравнений (1.27) остальные переменные находят из (1.23), (1.26)

$$\kappa_n = \frac{1}{2}\lambda_n + \frac{1}{2}\epsilon_n^0; \quad \mathcal{L}\xi_n = -\frac{1}{2}\lambda_n + \frac{1}{2}\epsilon_n^0; \quad \nu_n = \eta_n + \mu_n^0, \quad (1.28)$$

или из (1.21)

$$\dot{\xi}_n = 2\eta_n; \quad \dot{\kappa}_n = 2\mathcal{L}\eta_n; \quad \dot{\nu}_n = \lambda_n, \quad (1.29)$$

или из (1.24):

$$\ddot{\xi}_n = 2\lambda_n; \quad \ddot{\kappa}_n = 2\mathcal{L}\lambda_n; \quad \ddot{\nu}_n = 4\mathcal{L}\eta_n. \quad (1.30)$$

Удобно использовать физическую интерпретацию для величин

$$\kappa_n; \quad \pi_n \stackrel{\text{def}}{=} -\mathcal{L}\xi_n; \quad \epsilon_n \stackrel{\text{def}}{=} \kappa_n + \pi_n; \quad \lambda_n \stackrel{\text{def}}{=} \kappa_n - \pi_n, \quad (1.31)$$

характеризующих обобщенные энергии — кинетическую, потенциальную, полную и лагранжиан. При этом сохраняется полная энергия: $\epsilon_n = \epsilon_n^0$. Аналогичны (1.31)

$$\nu_n; \quad -\nu_{-n}; \quad 2\mu_n \stackrel{\text{def}}{=} \nu_n - \nu_{-n}; \quad 2\eta_n \stackrel{\text{def}}{=} \nu_n + \nu_{-n}, \quad (1.32)$$

где сохраняющейся величиной является $\mu_n = \mu_n^0$. Отметим дифференциальную связь (1.31) и (1.32):

$$\begin{aligned} \dot{\kappa}_n &= -\dot{\pi}_n = \frac{1}{2}\dot{\lambda}_n = 2\mathcal{L}\eta_n, & \dot{\epsilon}_n &= 0; \\ \dot{\nu}_n &= \dot{\nu}_{-n} = \dot{\eta}_n = \lambda_n, & \dot{\mu}_n &= 0. \end{aligned} \quad (1.33)$$

1.5. Стационарное однородное состояние

Под стационарным будем понимать состояние, в котором вторые производные ковариационных переменных (динамические слагаемые) обращаются в ноль. Согласно этому определению, первые производные некоторых переменных могут быть ненулевыми.

Ограничимся рассмотрением стационарного состояния в пространственно-однородном случае. Общий случай описан в 3.1. Обращая в ноль динамические слагаемые в уравнениях (1.30), получим

$$\lambda_n = 0; \quad \mathcal{L}\eta_n = 0. \quad (1.34)$$

Согласно (1.34), обобщенный лагранжиан λ_n обращается в ноль, а для аналогичной величины — симметричной части смешанной ковариации η_n — реализуется разностное уравнение, допускающее, но не требующее ее обращения в ноль. Уравнению (1.34),

по-видимому, удовлетворяет любая линейная функция ковариационного индекса. Комбинируя уравнения (1.34) с законами сохранения (1.23), получаем

$$\kappa_n = \pi_n = -\mathcal{L}\xi_n = \frac{1}{2}\epsilon_n^0; \quad \mathcal{L}\nu_n = -\mathcal{L}\nu_{-n} = \mathcal{L}\mu_n^0. \quad (1.35)$$

Для нахождения ξ_n и ν_n имеем систему уравнений

$$\mathcal{L}\xi_n = -\frac{1}{2}\epsilon_n^0; \quad \dot{\xi}_n = 2\eta_n; \quad \nu_n = \eta_n + \mu_n^0, \quad (1.36)$$

где η_n , согласно (1.29), (1.34), (1.36), удовлетворяет соотношениям

$$\mathcal{L}\eta_n = 0; \quad \dot{\eta}_n = 0, \quad (1.37)$$

то есть является линейной функцией n и не зависит от времени. Решение системы (1.36) существенно зависит от того, был ли реализован стационарный процесс, начиная с $t = 0$, или система вышла на него с течением времени. В первом случае допустимо интегрирование по времени уравнения для $\dot{\xi}_n$ из (1.36) с использованием начальных условий при $t = 0$, что дает

$$\xi_n = 2\eta_n t + \xi_n^0. \quad (1.38)$$

Подстановка соотношения (1.38) в первое уравнение (1.36) приводит к требованию, что начальные условия должны удовлетворять вироидальному соотношению

$$\mathcal{L}\xi_n^0 = -\frac{1}{2}\epsilon_n^0 \iff \pi_n^0 = \kappa_n^0. \quad (1.39)$$

Проверим осуществимость подобного решения. Запишем систему уравнений движения для однородного состояния (1.21) в виде

$$\dot{\xi}_n = 2\eta_n; \quad \dot{\kappa}_n = 2\mathcal{L}\eta_n; \quad \dot{\eta}_n = \kappa_n + \mathcal{L}\xi_n. \quad (1.40)$$

Антисимметрическая часть смешанной ковариации $\mu_n = \frac{1}{2}(\nu_n - \nu_{-n})$ постоянна и полностью определяется начальным состоянием. Полагая η_n постоянной величиной, получаем

$$\xi_n = 2\eta_n t + \xi_n^0; \quad \kappa_n = 2\mathcal{L}\eta_n t + \kappa_n^0; \quad 0 = \kappa_n + \mathcal{L}\xi_n. \quad (1.41)$$

Подстановка первого и второго уравнений (1.41) в третье дает

$$4\mathcal{L}\eta_n t + \kappa_n^0 + \mathcal{L}\xi_n^0 = 0 \Rightarrow \eta_n = 0, \quad \kappa_n^0 + \mathcal{L}\xi_n^0 = 0. \quad (1.42)$$

В результате получаем стационарное решение:

$$\xi_n = \xi_n^0 = 0; \quad \kappa_n = \kappa_n^0 = -\mathcal{L}\xi_n^0; \quad \eta_n = 0. \quad (1.43)$$

Таким образом, выполнение условий стационарности, начиная с $t = 0$, возможно только для решения, в котором все величины постоянны (а не только их первые производные). Такое движение будем называть строго стационарным.

Теперь рассмотрим ситуацию, когда стационарное решение не было реализовано при $t = 0$. Тогда некоторое время осуществлялся переходный процесс, приводящий к выходу на стационарное движение. Определим параметры стационарного движения. Еще раз выпишем связанные системы уравнений:

$$\dot{\xi}_n = 2\eta_n; \quad \dot{\kappa}_n = 2\mathcal{L}\eta_n; \quad \dot{\eta}_n = \kappa_n + \mathcal{L}\xi_n \quad (1.44)$$

или

$$\dot{\lambda}_n = 4\mathcal{L}\eta_n; \quad \dot{\eta}_n = \lambda_n. \quad (1.45)$$

Отметим предельные величины, отвечающие стационарному состоянию, верхним индексом s . Для них, согласно (1.34), (1.44), (1.45), выполняются соотношения

$$\dot{\xi}_n^s = 2\eta_n^s; \quad \dot{\eta}_n^s = 0; \quad \mathcal{L}\eta_n^s = 0; \quad \kappa_n^s = -\mathcal{L}\xi_n^s = \frac{1}{2}\epsilon_n^0; \quad \lambda_n^s = 0. \quad (1.46)$$

Интегрирование первого уравнения (1.46) с учетом третьего и четвертого дает

$$\xi_n^s = 2\eta_n^s t + c_n; \quad \mathcal{L}c_n = -\frac{1}{2}\epsilon_n^0, \quad (1.47)$$

где c_n — константы.

Таким образом, для нахождения параметров стационарного движения требуется решение уравнения (1.47) для c_n и вычисления предела решения начальной задачи

$$\ddot{\eta}_n = 4\mathcal{L}\eta_n; \quad \eta_n|_{t=0} = \eta_n^0; \quad \dot{\eta}_n|_{t=0} = \lambda_n^0 \quad (1.48)$$

при $t \rightarrow \infty$. Возможны три варианта:

- Предел равен нулю. Тогда ξ_n^s постоянна.
- Предел равен константе. Тогда ξ_n^s линейно зависит от времени.
- Предела нет (например, решение колеблется). Тогда стационарное движение отсутствует.

Для уравнения (1.48) существует простая механическая аналогия с исходным уравнением (1.1), что позволяет ответить на некоторые вопросы из общих физических соображений, не решая самого уравнения. В частности, если начальные условия нулевые, то решение уравнения (1.48) — тождественный ноль. Если начальные условия периодические, то в системе будет осуществляться колебательный процесс и предел при $t \rightarrow \infty$ не существует. Для начальных условий, соответствующих тепловому удару (1.8), $\eta_n^0 = 0; \lambda_n^0 = \sigma^2 \delta_n$, что соответствует удару по частице $n = 0$. В этом случае для свободного кристалла² решение стремится к конечному ненулевому пределу. Тогда, согласно (1.47), ковариация перемещений ξ_n^s со временем линейно увеличивается, то есть состояние не строго стационарное, хотя все остальные ковариации во времени постоянны.

²То есть при отсутствии подложки.

1.6. Обобщенные энергии

Введем величину

$$\epsilon_{pq} \stackrel{\text{def}}{=} \kappa_{pq} - \frac{1}{2}(\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q)\xi_{pq}. \quad (1.49)$$

Из уравнений (1.12) следует, что для введенной величины выполняется следующее уравнение баланса:

$$\dot{\epsilon}_{pq} = (\mathcal{L}_p - \mathcal{L}_q)\mu_{pq}, \quad (1.50)$$

где $\mu_{pq} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\nu_{pq} - \nu_{qp}}{2}$ — антисимметричная часть смешанной ковариации.

Рассмотрим оператор $\mathcal{L}_p - \mathcal{L}_q$. Индексы p и q будем называть позиционными — они определяют позиции (положения) двух частиц цепочки, для которых вычисляются ковариации. Наряду с ними введем пространственный и корреляционный индексы k и n :

$$k \stackrel{\text{def}}{=} p + q; \quad n \stackrel{\text{def}}{=} q - p. \quad (1.51)$$

В 2.2 показано, что для гармонического кристалла на упругой подложке (1.2) выполняются соотношения

$$\mathcal{L}_q - \mathcal{L}_p = \omega_0^2 \mathcal{D}_n \mathcal{D}_k; \quad \mathcal{D}u_i \stackrel{\text{def}}{=} u_{i+1} - u_{i-1}. \quad (1.52)$$

Перепишем соотношения (1.52):

$$\mathcal{L}_q - \mathcal{L}_p = \mathcal{R}_n \mathcal{D}_k, \quad (1.53)$$

где $\mathcal{R}_n = \omega_0^2 \mathcal{D}_n$.

Тогда из уравнения (1.50) следует, что производная по времени от ϵ_{pq} пропорциональна конечной разности по пространственному индексу. Следовательно, для однородного по пространству состояния кристалла правая часть (1.50) равна нулю и величина ϵ_{pq} сохраняется. Это позволяет интерпретировать ее как некоторую энергию. Будем называть ее обобщенной (ковариационной)

энергией пары частиц (отнесенной к массе частицы). При $p = q$ обобщенная энергия дает удвоенную удельную энергию частицы. Для обобщенной энергии, согласно (1.50) и (1.53), выполняется уравнение баланса

$$\dot{\epsilon}_{pq} = -\mathcal{D}_k \chi_{pq}, \quad \chi_{pq} \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{R}_n \mu_{pq}, \quad (1.54)$$

где χ_{pq} играет роль потока обобщенной энергии.

Если κ_{pq} интерпретировать как величину, пропорциональную³ обобщенной кинетической энергии, то, согласно (1.49),

$$\pi_{pq} \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{1}{2}(\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q)\xi_{pq} \quad (1.55)$$

соответствует обобщенной потенциальной энергии. Сумма и разность этих энергий дают обобщенный гамильтониан и лагранжиан пары частиц:

$$\epsilon_{pq} \stackrel{\text{def}}{=} \kappa_{pq} + \pi_{pq}; \quad \lambda_{pq} \stackrel{\text{def}}{=} \kappa_{pq} - \pi_{pq}. \quad (1.56)$$

Согласно (1.13), обобщенный лагранжиан имеет простую дифференциальную связь с ковариацией перемещений:

$$\lambda_{pq} = \frac{1}{2}\ddot{\xi}_{pq}. \quad (1.57)$$

Первые производные по времени от обобщенных энергий выражаются через смешанные ковариации ν_{pq} и ν_{qp} , вторые производные — через ковариации перемещений и скоростей ξ_{pq} и κ_{pq} и не выражаются напрямую через обобщенные энергии. Тем не менее возможно получение замкнутой системы уравнений динамики обобщенных энергий (см. Приложение 1). Для дальнейшего анализа важны незамкнутые уравнения 2-го порядка:

$$\begin{aligned} (\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q)\ddot{\epsilon}_{pq} - \frac{1}{2}(\mathcal{L}_p - \mathcal{L}_q)^2 \epsilon_{pq} &= -\frac{1}{2}(\mathcal{L}_p - \mathcal{L}_q)^2 \lambda_{pq}; \\ \ddot{\lambda}_{pq} - 2(\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q)\lambda_{pq} &= -\frac{1}{2}(\mathcal{L}_p - \mathcal{L}_q)^2 \xi_{pq}. \end{aligned} \quad (1.58)$$

³Коэффициент пропорциональности равен $m/2$.

Первое уравнение (1.58) получают дифференцированием уравнения (1.50), второе следует из уравнения (1.14) с учетом тождества (1.57). Правые части уравнений (1.58) оказываются малыми для медленных (первое уравнение) и быстрых (второе уравнение) процессов, тем самым левые части данных уравнений дают приближенные уравнения динамики гамильтониана и лагранжиана. Небольшая модификация превращает (1.58) в замкнутую систему (П.1.4) относительно ϵ_{pq} и λ_{pq} , которая может использоваться для получения приближенных решений произвольной точности.

Отметим, что существует альтернативный способ введения обобщенных энергий (см. формулы в 3.2).

1.7. Смешанные ковариации

Как указывалось ранее, в разделе 1.4 при рассмотрении однородного состояния смешанные ковариации аналогичны обобщенным энергиям. Так, антисимметричная смешанная ковариация удовлетворяет уравнению баланса

$$\dot{\mu}_{pq} = \frac{1}{2}(\mathcal{L}_q - \mathcal{L}_p)\xi_{pq}, \quad (1.59)$$

аналогичному уравнению баланса обобщенной энергии (1.50). В пространственно-однородном состоянии μ_{pq} , как и полная обобщенная энергия ϵ_{pq} , сохраняется. Симметричная и антисимметричная части смешанной ковариации образуют замкнутую систему уравнений 2-го порядка:

$$\ddot{\eta}_{pq} = 2(\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q)\eta_{pq} + (\mathcal{L}_p - \mathcal{L}_q)\mu_{pq}; \quad \ddot{\mu}_{pq} = (\mathcal{L}_q - \mathcal{L}_p)\eta_{pq}. \quad (1.60)$$

1.8. Континализация

Ковариации могут быть записаны в виде

$$\xi_{pq} = \xi_n(x); \quad n \stackrel{\text{def}}{=} q - p; \quad x \stackrel{\text{def}}{=} \frac{ak}{2} = a \frac{p+q}{2}, \quad (1.61)$$

где n и k — корреляционный и пространственный индексы; x — пространственная координата; a — шаг кристаллической решетки.

Индекс k используется при микроскопическом дискретном описании, координата x — при макроскопическом континуальном описании. Зависимость ковариаций от x будем считать достаточно гладкой, чтобы они допускали разложение в ряд Тейлора.

В первом континуальном приближении справедливо представление

$$\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q = 2\mathcal{L}; \quad \mathcal{L}_q - \mathcal{L}_p = a\mathcal{R}\partial_x, \quad (1.62)$$

где \mathcal{L} и \mathcal{R} — линейные разностные операторы; ∂_x — производная по пространственной координате x .

Операторы \mathcal{L} и \mathcal{R} действуют на корреляционный индекс n , причем оператор \mathcal{L} совпадает с разностным оператором, действующим в исходном уравнении движения (1.1), оператор \mathcal{R} определен соотношением (1.53). Для цепочки на упругом основании (1.2) выполняются соотношения

$$\mathcal{L} = \omega_0^2 \Delta^2 - \omega_1^2; \quad \mathcal{R} = \omega_0^2 \mathcal{D}, \quad (1.63)$$

или в явном виде

$$\mathcal{L}\xi_n = \omega_0^2(\xi_{n+1} - 2\xi_n + \xi_{n-1}) - \omega_1^2\xi_n; \quad \mathcal{R}\xi_n = \omega_0^2(\xi_{n+1} - \xi_{n-1}). \quad (1.64)$$

Формулы (1.63) могут быть легко получены из (1.2) и (1.52). Альтернативный вывод формул (1.64) дан в 2.3.

Введем две частоты: высокую ω и низкую Ω . Частота ω описывает быстрые индивидуальные движения атомов, частота Ω характеризует медленные коллективные движения макроскопической группы атомов. Согласно уравнению движения (1.1),

$$\ddot{u} = \mathcal{L}u \quad \Rightarrow \quad \mathcal{L} \sim \omega^2, \quad (1.65)$$

иными словами, оператор \mathcal{L} характеризует быстрые индивидуальные движения атомов. Для цепочки на подложке $\omega \sim \omega_0 \sim \omega_1$, $\mathcal{R} \sim \omega^2$. Для частоты длинноволновых колебаний цепочки Ω выполняется оценка

$$\Omega \sim \omega a \partial_x \sim c \partial_x, \quad (1.66)$$

где $c \stackrel{\text{def}}{=} \omega_0 a$ — скорость звука в кристалле; малый параметр $a \partial_x$ — безразмерный дифференциальный оператор по пространственной координате. Тогда из (1.62)–(1.63)

$$\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q \sim \omega^2; \quad \mathcal{L}_q - \mathcal{L}_p \sim \omega \Omega. \quad (1.67)$$

Данные оценки потребуются далее для разделения тепловых процессов на быстрые и медленные.

1.9. Быстрые и медленные процессы

Рассмотрим уравнение динамики ковариаций (1.15):

$$\mathfrak{L} \xi_{pq} = 0; \quad \mathfrak{L} \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{L}_t^2 - 2\mathcal{L}_t(\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q) + (\mathcal{L}_p - \mathcal{L}_q)^2. \quad (1.68)$$

Возможны два варианта асимптотической оценки для оператора \mathcal{L}_t : для быстрых процессов $\mathcal{L}_t \sim \omega^2$, для медленных процессов $\mathcal{L}_t \sim \Omega^2$. Тогда для быстрых процессов первые два слагаемых в операторе \mathfrak{L} имеют порядок ω^4 , третье — порядок $\omega^2 \Omega^2$ и может быть отброшено. Для медленных процессов, напротив, можно пренебречь первым слагаемым, имеющим порядок Ω^2 , что мало по сравнению со вторым и третьим слагаемыми, имеющими

порядок $\omega^2 \Omega^2$. В результате для оператора \mathfrak{L} при быстрых и медленных процессах получаем следующие аппроксимации:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_t \sim \omega^2 : \quad & \mathfrak{L} \approx \mathcal{L}_t \left(\mathcal{L}_t - 2(\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q) \right); \\ \mathcal{L}_t \sim \Omega^2 : \quad & \mathfrak{L} \approx -2\mathcal{L}_t(\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q) + (\mathcal{L}_p - \mathcal{L}_q)^2. \end{aligned} \quad (1.69)$$

Для быстрых процессов это приводит к уравнению

$$\ddot{\xi}_{pq} - 2(\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q)\xi_{pq} = A_{pq} + B_{pq}t, \quad (1.70)$$

где A_{pq} и B_{pq} — константы, полученные в результате двукратного интегрирования по времени (определяются из начальных условий).

Уравнение для медленных процессов имеет вид

$$2(\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q)\ddot{\xi}_{pq} = (\mathcal{L}_p - \mathcal{L}_q)^2\xi_{pq}. \quad (1.71)$$

Таким образом, в обоих случаях получают уравнение 2-го порядка по времени. Отметим, что приближенные уравнения (1.70)–(1.71) справедливы для ковариаций ξ_{pq} , κ_{pq} , $\dot{\nu}_{pq}$, а также для любой их комбинации.

Запишем оператор \mathfrak{L} и его аппроксимации (1.70)–(1.71) в первом континуальном приближении (1.62):

$$\mathfrak{L} = \partial_t^4 - 4\mathcal{L}\partial_t^2 + a^2\mathcal{R}^2\partial_x^2; \quad (1.72)$$

$$\begin{aligned} \partial_t \sim \omega : \quad & \mathfrak{L} \approx \partial_t^2 (\partial_t^2 - 4\mathcal{L}); \\ \partial_t \sim \Omega : \quad & \mathfrak{L} \approx -4\mathcal{L}\partial_t^2 + a^2\mathcal{R}^2\partial_x^2. \end{aligned} \quad (1.73)$$

Из (1.73) следует, что для быстрых процессов оператор не содержит дифференцирования по пространственной координате, следовательно, пространственный перенос тепла отсутствует. Для медленных процессов, напротив, вторая производная по времени противопоставляется второй производной по координате, что

свидетельствует о волновом характере переноса тепла в системе. Однако волновая картина искажается наличием разностных операторов по корреляционному индексу, в результате процесс распространения тепла приобретает дополнительную специфику.

1.10. Динамика быстрых процессов

Как показано ранее (1.70), в приближении быстрых процессов не происходит распространения тепла и динамика процесса в каждой точке кристалла определяется локальным состоянием в этой точке. Поэтому при исследовании данного случая удобно ограничиться пространственно-однородным состоянием кристалла, рассмотренным ранее в разделе 1.4. Полученные уравнения можно приближенно использовать и для кристалла, тепловое состояние которого медленно изменяется в пространстве. В этом случае характеристики указанного состояния войдут как параметры в уравнения, полученные для однородного состояния.

Воспользуемся уравнением (1.58) для обобщенного лагранжиана:

$$\ddot{\lambda}_{pq} - 2(\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q)\lambda_{pq} = -\frac{1}{2}(\mathcal{L}_p - \mathcal{L}_q)^2\xi_{pq}. \quad (1.74)$$

В пространственно-однородном состоянии все ковариации не зависят от пространственного индекса $k = p+q$. В этом случае оператор $\mathcal{L}_p - \mathcal{L}_q$, содержащий, согласно (1.53), конечную разность по k , обращает ковариации в ноль. Тогда из уравнений (1.50) и (1.74) получаем уравнения пространственно-однородного состояния

$$\dot{\epsilon}_{pq} = 0; \quad \ddot{\lambda}_{pq} - 2(\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q)\lambda_{pq} = 0. \quad (1.75)$$

Отметим, что уравнение (1.75) для λ_{pq} совпадает с уравнением быстрых процессов (1.70), однако из (1.75) следует, что константы интегрирования A_{pq} и B_{pq} для обобщенного лагранжиана λ_{pq}

равны нолю. Ковариации ξ_{pq} , κ_{pq} и π_{pq} также удовлетворяют уравнению (1.70), однако для них константы A_{pq} и B_{pq} в ноль не обращаются. Поэтому при рассмотрении быстрых процессов в качестве основных ковариаций удобно брать ϵ_{pq} и λ_{pq} , а все остальные выражать через них. Альтернативно, как было показано в разделе 1.4, в качестве основных могут быть выбраны симметричная и несимметричная часть смешанных ковариаций, для которых в однородном состоянии выполняются уравнения, аналогичные (1.75):

$$\dot{\mu}_{pq} = 0; \quad \ddot{\eta}_{pq} - 2(\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q)\eta_{pq} = 0. \quad (1.76)$$

Рассмотрим подробнее уравнения (1.75). Переход в них к корреляционному индексу $n = q - p$ дает

$$\dot{\epsilon}_n = 0; \quad \ddot{\lambda}_n = 4\mathcal{L}\lambda_n. \quad (1.77)$$

Отметим, что уравнение (1.77) для λ_n с точностью до множителя совпадает с уравнением динамики цепочки (1.1). Начальные условия для уравнений (1.77) имеют вид

$$\epsilon_n^0 = \kappa_n^0 - \mathcal{L}\xi_n^0; \quad \lambda_n^0 = \kappa_n^0 + \mathcal{L}\xi_n^0; \quad \dot{\lambda}_n^0 = 4\mathcal{L}\nu_n^0. \quad (1.78)$$

После решения начальной задачи (1.77)–(1.78) обобщенные кинетическая и потенциальная энергии находят по формулам

$$\kappa_n = \frac{1}{2}(\epsilon_n^0 + \lambda_n), \quad \pi_n = \frac{1}{2}(\epsilon_n^0 - \lambda_n). \quad (1.79)$$

Для нахождения ξ_n требуется дополнительно решение одного из двух уравнений, дифференциального или разностного:

$$\ddot{\xi}_n = 2\lambda_n; \quad \mathcal{L}\xi_n = -\pi_n. \quad (1.80)$$

Для мгновенного теплового возмущения (1.8) начальные условия (1.78) принимают вид

$$\epsilon_n^0 = \sigma^2\delta_n; \quad \lambda_n^0 = \sigma^2\delta_n; \quad \dot{\lambda}_n^0 = 0. \quad (1.81)$$

Комбинируя (1.77) и (1.81), получаем для λ_n начальную задачу:

$$\ddot{\lambda}_n = 4\mathcal{L}\lambda_n; \quad \lambda_n^0 = \sigma^2\delta_n; \quad \dot{\lambda}_n^0 = 0. \quad (1.82)$$

Начальная задача (1.82) эквивалентна начальной задаче для кристалла, описываемого уравнением (1.1), где начальные условия представляют собой сдвиг частицы u_0 на σ^2 . Очевидно, что с течением времени такой кристалл приходит в положение равновесия, следовательно, $\lambda_n \rightarrow 0$. Это означает: со временем обобщенный лагранжиан обращается в ноль, а обобщенные кинетическая и потенциальная энергии уравниваются, что согласуется с теоремой о вириале. Так как в начальный момент времени вся энергия была заключена в кинетической составляющей, то при достижении равновесного состояния кинетическая энергия снижается ровно в два раза по сравнению с начальным значением.

При отсутствии подложки начальная задача (1.82) имеет простое решение [33]:

$$\lambda_n = \sigma^2 J_{2n}(4\omega_0 t) \approx (-1)^n \frac{\sigma^2 \cos\left(4\omega_0 t - \frac{\pi}{4}\right)}{\sqrt{2\pi\omega_0 t}}, \quad (1.83)$$

где J — функция Бесселя первого рода.

Приближенное равенство в (1.83) асимптотически точно при больших значениях t , однако оно дает хорошую точность уже при $t \geq \tau_0$, где $\tau_0 = 2\pi/\omega_0$. График функции $\lambda_0(t)$ представлен на рис. 1.1. Напомним, что в пространственно-однородном состоянии кристалла функция $\lambda_0(t)$ пропорциональна разности кинетической и потенциальной энергий кристалла, поэтому график на рис. 1.1 демонстрирует переходный процесс, приводящий к уравниванию этих двух энергий.

При наличии подложки формула (1.83) имеет более сложный

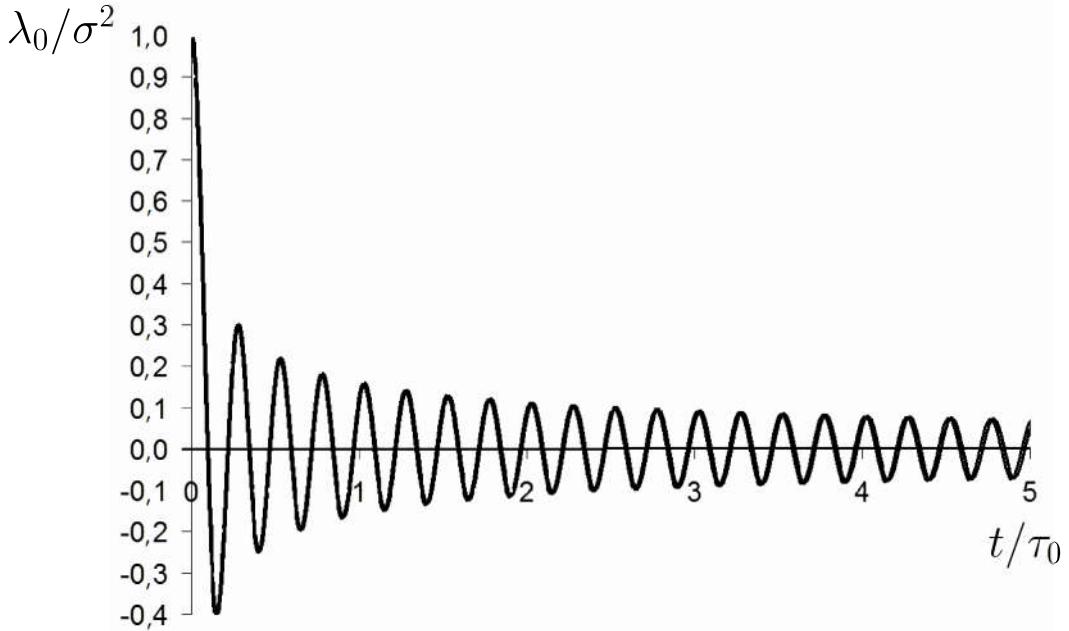


Рис. 1.1. Переходный процесс, приводящий к уравниванию кинетической и потенциальной энергии кристалла ($\tau_0 = 2\pi/\omega_0$)

вид. Для $n = 0$, согласно [34],

$$\lambda_0 = \frac{2\sigma^2}{\pi} \int_0^{\pi/2} \cos \left(2\sqrt{4\omega_0^2 \sin^2 p + \omega_1^2} t \right) dp. \quad (1.84)$$

Согласно [35], этот интеграл может быть преобразован к виду

$$\lambda_0 = \frac{2\sigma^2}{\pi} \int_{2\omega_1}^{2\omega_2} \frac{\cos(\omega t) \omega d\omega}{\sqrt{(\omega^2 - 4\omega_1^2)(4\omega_2^2 - \omega^2)}}, \quad (1.85)$$

где

$$\omega_2 \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\omega_1^2 + 4\omega_0^2} = \sqrt{\frac{C_1 + 4C}{m}}. \quad (1.86)$$

Интегралы (1.84)–(1.85) не вычисляются явно, однако справедлива приближенная формула [35]

$$\lambda_0/\sigma^2 \simeq J_0(2\omega_2 t) - \frac{\omega_1}{2\omega_0} J_1(2\omega_1 t) + \left(1 - \frac{\omega_2}{2\omega_0}\right) J_2(2\omega_2 t), \quad (1.87)$$

где J_k — функции Бесселя первого рода.

Формула (1.87) асимптотически точна при больших значениях t , дает правильное значение при $t = 0$ и незначительную абсолютную погрешность при любых значениях времени. В [35] получена также асимптотическая формула, выраженная в элементарных функциях:

$$\lambda_0/\sigma^2 \simeq \frac{\sqrt{\omega_1} \cos\left(2\omega_1 t + \frac{\pi}{4}\right) + \sqrt{\omega_2} \cos\left(2\omega_2 t - \frac{\pi}{4}\right)}{2\omega_0 \sqrt{\pi t}}. \quad (1.88)$$

Формулу (1.88) не применяют в окрестности ноля, однако уже для $t \geq \tau_0/2$ она дает точность, при которой графики приближенного и точного решений практически неотличимы [35]. Таким образом, при наличии подложки переходный процесс затухает обратно пропорционально корню из времени, так же как и при отсутствии подложки. При наличии подложки переходный процесс характеризуется сложением двух затухающих колебаний с разными частотами. Для мягкой подложки указанные частоты сильно различаются, для жесткой они близки и в системе реализуются биения. Система также остается устойчивой при отрицательной жесткости связи, лежащей в пределах $-\frac{1}{4}C_1 < C < 0$. При этом реализуется процесс, сходный со случаем положительных значениях C , однако формулы (1.85), (1.87) и (1.88) требуют модификации.

Кинетическая температура формально может быть определена формулой (1.20) в любой момент времени. Однако введение температуры более естественно после завершения переходного процесса, когда прекращается периодическая перекачка энергии из кинетической в потенциальную. В результате, используя (1.20) и (1.78)–(1.79), получаем для кинетической температуры, установившейся после мгновенного теплового возмущения (1.8),

формулу

$$T = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{m\kappa_n}{2k_B} \Big|_{n=0} = \frac{m\sigma^2}{2k_B}. \quad (1.89)$$

1.11. Динамика медленных процессов

Воспользуемся уравнением (1.58) для обобщенного гамильтониана:

$$2(\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q)\ddot{\epsilon}_{pq} - (\mathcal{L}_p - \mathcal{L}_q)^2 \epsilon_{pq} = -(\mathcal{L}_p - \mathcal{L}_q)^2 \lambda_{pq}. \quad (1.90)$$

По затухании быстрого процесса лагранжиан практически обращается в ноль, в результате уравнение (1.90) принимает вид

$$2(\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q)\ddot{\epsilon}_{pq} = (\mathcal{L}_p - \mathcal{L}_q)^2 \epsilon_{pq}. \quad (1.91)$$

Уравнение (1.91) совпадает с уравнением (1.71), полученным в результате разделения процессов. Поскольку обобщенный гамильтониан ϵ_{pq} не участвует в быстрых процессах, то уравнение медленных процессов логичнее записывать для него, а не для других ковариаций. Так как обобщенный лагранжиан λ_{pq} в рассматриваемом приближении обращается в ноль, то обобщенная кинетическая энергия κ_{pq} совпадает с $\epsilon_{pq}/2$. Тогда процесс можно считать термодинамически равновесным, и при $p = q$ данные величины дают кинетическую температуру:

$$k_B T = m \langle v_p^2 \rangle = m\kappa_{pq}|_{p=q} = m\epsilon_{pq}|_{p=q}. \quad (1.92)$$

Перейдем в уравнении (1.91), к корреляционному индексу n и пространственной координате x (1.61). Тогда в первом континуальном приближении (1.62) уравнение (1.91) принимает вид

$$4\mathcal{L}\ddot{\epsilon}_n = a^2 \mathcal{R}^2 \epsilon_n'', \quad (1.93)$$

где a — шаг решетки кристалла; \mathcal{L}, \mathcal{R} — разностные операторы; штрихом обозначена производная по пространственной координате x .

Операторы \mathcal{L} и \mathcal{R} действуют на корреляционный индекс n , причем оператор \mathcal{L} совпадает с разностным оператором, действующим в исходном уравнении движения (1.1). Для цепочки на упругом основании операторы \mathcal{L} и \mathcal{R} имеют вид (1.64), что позволяет записать уравнение (1.93) в форме

$$4(\epsilon_{n+1} - \lambda\epsilon_n + \epsilon_{n-1})^{\ddot{\cdot}} = c^2(\epsilon_{n+2} - 2\epsilon_n + \epsilon_{n-2})'' , \quad (1.94)$$

где $\lambda \stackrel{\text{def}}{=} 2 + \omega_1^2/\omega_0^2$ — безразмерный коэффициент; $c \stackrel{\text{def}}{=} a\omega_0$ — скорость звука в кристалле.

Введем нелокальную температуру [9]:

$$k_B(-1)^n \theta_n \stackrel{\text{def}}{=} m\kappa_n = m \left\langle v_p v_q \right\rangle|_{p=q}, \quad (1.95)$$

где k_B — постоянная Больцмана.

Так как для медленных процессов $\kappa_n = \epsilon_n/2$, то уравнение (1.94) для нелокальной температуры записывают в виде

$$4(\theta_{n+1} + \lambda\theta_n + \theta_{n-1})^{\ddot{\cdot}} = c^2(\theta_{n+2} - 2\theta_n + \theta_{n-2})'' . \quad (1.96)$$

После решения уравнения (1.96) кинетическая температура определяется формулой

$$T(t, x) = \theta_n(t, x)|_{n=0}. \quad (1.97)$$

При отсутствии упругого основания выполняются соотношения

$$\mathcal{L}u_n = \omega_0^2 \Delta^2; \quad \mathcal{R}^2 = -\mathcal{L}(-1)^n \mathcal{L}(-1)^n, \quad (1.98)$$

что позволяет записать уравнение (1.93) в виде

$$4\mathcal{L}\ddot{\epsilon}_n = -a^2 \mathcal{L}(-1)^n \mathcal{L}(-1)^n \epsilon_n''. \quad (1.99)$$

Один из операторов \mathcal{L} устраняется двукратным суммированием по n . Тогда после перехода к нелокальной температуре приходим к уравнению

$$\ddot{\theta}_n + \frac{a^2}{4} \mathcal{L} \theta_n'' = 0. \quad (1.100)$$

Констант суммирования в правой части уравнения не появляется [8]. Преобразование Фурье по x дает для фурье-образа $\hat{\theta}_n$ уравнение

$$\ddot{\hat{\theta}}_n = \left(\frac{ak}{2}\right)^2 \mathcal{L} \hat{\theta}_n, \quad (1.101)$$

где k — волновое число.

Уравнение (1.101) с точностью до постоянного множителя совпадает с исходным уравнением (1.1) динамики частиц кристалла. Это позволяет построить аналитическое решение уравнений (1.100)–(1.101) (см. раздел 1.12).

Несмотря на внешние различия уравнений (1.96) и (1.100), можно показать [34], что эволюция температурного профиля при мгновенном тепловом возмущении в них описывается одним и тем же законом, отличие состоит лишь в более низкой скорости распространения теплового фронта для уравнения (1.96).

1.12. Распространение тепла в свободном кристалле

Рассмотрим сначала частный случай отсутствия упругого основания при начальных условиях, отвечающих мгновенному тепловому возмущению (1.8). Соответствующая начальная задача для нелокальной температуры θ_n имеет вид

$$\begin{aligned} \ddot{\theta}_n + \frac{1}{4} c^2 (\theta_{n-1} - 2\theta_n + \theta_{n+1})'' &= 0; \\ \theta_n|_{t=0} = T_0(x)\delta_n; \quad \dot{\theta}_n|_{t=0} &= 0, \end{aligned} \quad (1.102)$$

где $c = \omega_0 a$ — скорость звука в кристалле; $T_0(x) = \frac{1}{2k_B}m\sigma^2(x)$ — начальное пространственное распределение температуры; $\delta_n = 1$ для $n = 0$ и $\delta_n = 0$ для $n \neq 0$.

Начальные условия (1.102) взяты после окончания высокочастотного переходного процесса, что позволяет использовать для T_0 формулу (1.89). Интегральное преобразование Фурье по пространственной координате позволяет решить задачу (1.102) аналитически [8, 9]. Для фурье-образа $\hat{\theta}_n(t, k)$ получаем

$$\begin{aligned}\ddot{\hat{\theta}}_n &= \frac{1}{4}c^2k^2(\hat{\theta}_{n-1} - 2\hat{\theta}_n + \hat{\theta}_{n+1}); \\ \hat{\theta}_n|_{t=0} &= \hat{T}_0(k)\delta_n; \quad \dot{\hat{\theta}}_n|_{t=0} = 0,\end{aligned}\tag{1.103}$$

где k — волновое число; $\hat{T}_0(k)$ — фурье-образ начального распределения температуры $T_0(x)$.

Задача (1.103) является частным случаем задачи (1.82), эквивалентной начальной задаче для кристалла, описываемого уравнением (1.1), где начальные условия представляют собой сдвиг частицы u_0 на σ^2 . Как было указано ранее (1.83), задача (1.103) эффективно решается с помощью функций Бесселя. Отметим, что функции Бесселя играют важную роль при описании динамических процессов в гармонических цепочках, в частности, в [15, 16] функции Бесселя использованы для описания ударноволновых процессов. Аналогично (1.83) задача (1.94) имеет аналитическое решение: $\hat{\theta}_n(t, k) = \hat{T}_0(k)J_{2n}(ckt)$, где J_{2n} — функции Бесселя первого рода. Наиболее интересен вариант $n = 0$, который дает фурье-образ $\hat{T}(t, k)$ распределения кинетической температуры:

$$\hat{T}(t, k) = \hat{T}_0(k)J_0(ckt).\tag{1.104}$$

Из формулы (1.104) следует, что образ $\hat{T}(t, k)$ удовлетворяет

дифференциальному уравнению Бесселя

$$\ddot{\hat{T}} + \frac{1}{t}\dot{\hat{T}} = -c^2 k^2 \hat{T}. \quad (1.105)$$

Применение обратного преобразования Фурье к уравнению (1.105) приводит к дифференциальному уравнению в частных производных для температурного поля:

$$\ddot{T} + \frac{1}{t}\dot{T} = c^2 T''. \quad (1.106)$$

Уравнение (1.106) отличается от классического уравнения теплопроводности наличием второй производной по времени и переменного множителя при первой производной. Внешне оно ближе к уравнению гиперболической теплопроводности Максвелла—Каттанео—Вернотте [36], однако имеет существенное отличие: вместо времени релаксации (константа) в уравнение (1.106) входит физическое время (переменная). С этим связано то, что уравнение (1.106), в отличие от известных макроскопических уравнений переноса тепла, обратимо по времени (уравнение симметрично относительно замены t на $-t$).

Согласно (1.102), начальные условия для уравнения (1.106)

$$T|_{t=0} = T_0(x); \quad \dot{T}|_{t=0} = 0. \quad (1.107)$$

Применение обратного преобразование Фурье к формуле (1.104) дает аналитическое решение начальной задачи (1.106)–(1.107):

$$T(t, x) = \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{T_0(x - cts)}{\sqrt{1 - s^2}} ds. \quad (1.108)$$

Отметим, что благодаря обращению в ноль $\dot{T}|_{t=0}$ (1.107) в решении (1.108) уравнения (1.106) не возникает особенности при $t = 0$. Условие $\dot{T}|_{t=0} = 0$ является следствием начальных условий (1.8), соответствующих мгновенному тепловому возмущению кристалла, при котором в начальный момент времени отсутствуют тепловые потоки. Приведем также альтернативную

форму записи решения (1.108):

$$T(t, x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} T_0 \left(x - ct \sin \frac{p}{2} \right) dp. \quad (1.109)$$

Для начальной задачи с ненулевыми начальными потоками ($\dot{T}|_{t=0} \neq 0$) можно получить решение, аналогичное (1.108). В этом случае также можно получить дифференциальное уравнение, описывающее распространение тепла, однако оно намного сложнее, чем уравнение (1.106).

Приведем результат расчета по формуле (1.108) для двух вариантов начального распределения температуры (подробнее о таких решениях см. в [9]).

Синусоидальное тепловое возмущение:

$$T_0(x) = A_0 \sin kx + B \Rightarrow T(t, x) = A_0 J_0(kct) \sin kx + B, \quad (1.110)$$

где A_0 — амплитуда теплового возмущения; B — тепловой фон; $k = 2\pi/\lambda$ — волновое число (λ — длина волны теплового возмущения).

Графики, демонстрирующие практически полное совпадение зависимости (1.110) амплитуды теплового возмущения $A(t) = A_0 J_0(kct)$ с результатами молекулярно-динамического (МД) моделирования [9], представлены на рис. 1.2.

Ступенчатое начальное распределение температуры, моделирующее перераспределение тепла между горячим и холодным телом:

$$T_0(x) = (T_2 - T_1)H(-x) + T_1 \Rightarrow T(t, x) = \frac{T_2 - T_1}{\pi} \arccos \frac{x}{ct} + T_1, \quad (1.111)$$

где $T_2 > T_1$ — температура горячего и холодного тела соответственно; $H(x)$ — функция Хевисайда (ноль для $x < 0$ и единица для $x > 0$); при $|x| > ct$ сохраняется исходное распределение температуры.

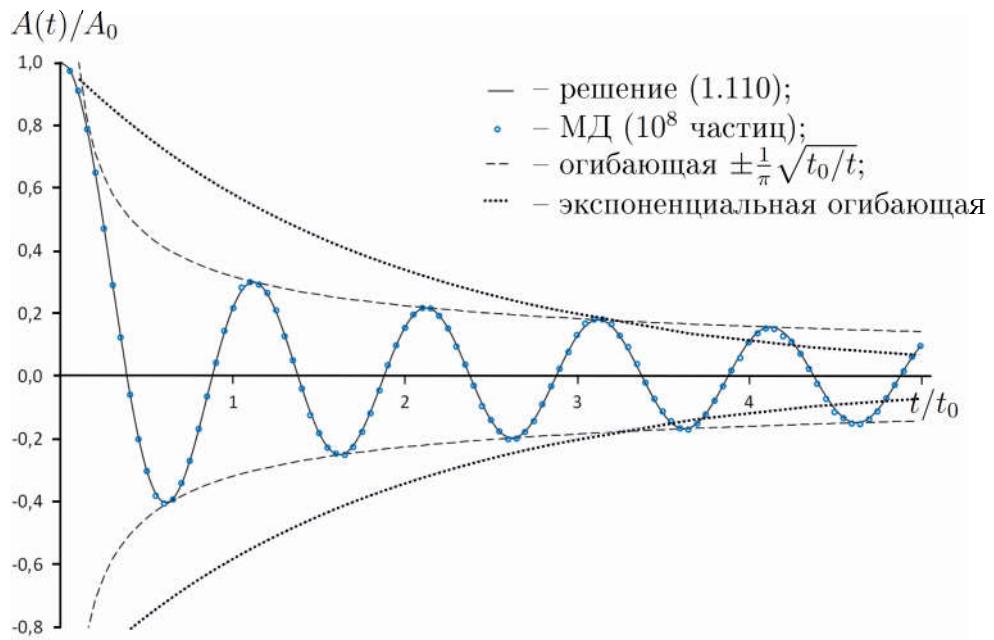


Рис. 1.2. Колебательное затухание амплитуды теплового возмущения: сравнение аналитического решения (1.110) с результатами молекулярно-динамического моделирования (10^4 цепочек по 10^4 частиц в каждой; $t_0 = \lambda/c$)

На рис. 1.3 сравнивается решение (1.111) с молекулярно-динамическим моделированием [9] при различном числе частиц. Графики наглядно демонстрируют сходимость численного решения к аналитическому при увеличении числа частиц.

Таким образом, для обеих задач получают простое аналитическое решение. Такие решения кардинально отличаются от решений на основе классической теории распространения тепла, использующей закон теплопроводности Фурье. В первой задаче классическая теплопроводность дает экспоненциальное неколебательное затухание, во второй — мгновенное распространение бесконечно малого возмущения по всему кристаллу с последующим замедлением передачи тепла, напротив, решение (1.110) — колебательное затухание возмущения, обратно пропорциональное корню из времени, решение (1.111) — распространение тепла с постоянной скоростью c . Последний результат понятнее с физической точки зрения, кроме того, он лучше согласуется с последними экспериментальными данными по распространению

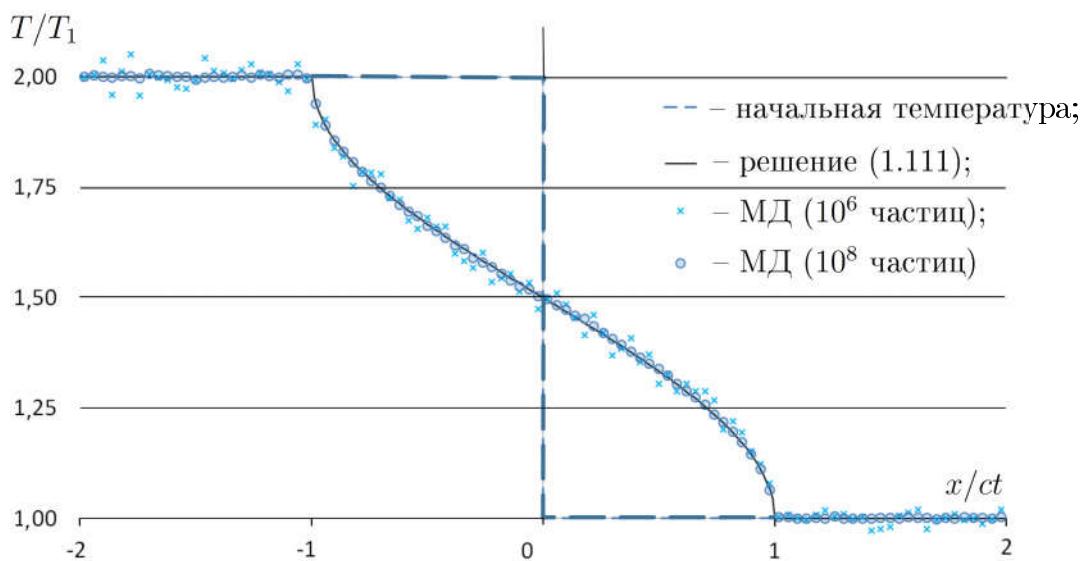


Рис. 1.3. Распространение тепла из горячей в холодную область кристалла (аналитическое решение (1.111) сравнивается с молекулярно-динамическим моделированием: 10^3 цепочек по 10^3 частиц (крест — осреднение по 10 частицам); 10^4 цепочек по 10^4 частиц (кружок — осреднение по 100 частицам)

тепла в наноструктурах [2, 4].

При наличии упругого основания, как показано в [37], распространение тепла описывается уравнениями (1.106)–(1.108), однако вместо скорости звука $c = \omega_0 a$ в них входит максимальная групповая скорость, реализуемая в кристалле.

1.13. Выводы

Изложен метод, позволяющий аналитически описывать тепловые процессы в одномерных гармонических кристаллах. Проведен переход от стохастической задачи для перемещений частиц к детерминированной задаче для ковариаций скоростей или перемещений. Задача сводится к линейным уравнениям, дифференциальным по времени и разностным по двум позиционным индексам пары частиц. Выведена замкнутая система уравнений, содержащая четыре уравнения 1-го порядка, два уравнения 2-го порядка или одно уравнение 4-го порядка по времени.

Показана возможность разделения тепловых процессов на быстрые и медленные. К быстрым процессам относится выравнивание кинетической и потенциальной энергий, к медленным — распространение тепла. Для данных процессов удается приблизенно получить независимые дифференциально-разностные уравнения 2-го порядка. Далее, осуществляется переход от позиционных индексов пары частиц к пространственной координате и корреляционному индексу. Пространственная координата характеризует положение центра пары частиц, корреляционный индекс — удаленность частиц, принадлежащих паре, друг от друга. По пространственной координате проводится континуализация. В результате для быстрых процессов получают уравнение, дифференциальное по времени и разностное по корреляционному индексу. Уравнение не содержит дифференцирования по пространственной координате и поэтому описывает изолированные процессы в каждой точке пространства, переноса тепла для быстрых процессов не наблюдается. После завершения быстрого переходного процесса кинетическая и потенциальная энергии становятся равны, что согласуется с теоремой о вириале.

Для медленных процессов получено уравнение 2-го порядка (1.93), дифференциальное по времени и координате, но разностное по корреляционному индексу (можно интерпретировать уравнение (1.93) как бесконечную систему волновых дифференциальных уравнений в частных производных). Дифференциально-разностное уравнение (1.93) описывает перенос тепла в кристалле. Решение уравнения в случае мгновенного теплового возмущения позволяет получить замкнутое дифференциальное уравнение в частных производных для кинетической температуры (1.106), допускающее простое аналитическое решение. Особенностью уравнения (1.106) является то, что оно обратимо по времени. Противоречие между обратимостью микроскопических и необратимостью макроскопических уравнений — один из важных вопросов современной физики [7]. Урав-

нение (1.106) позволяет по-новому взглянуть на эту проблему: оно демонстрирует, что существуют процессы распространения тепла, описываемые на макроскопическом уровне обратимыми уравнениями (симметричными относительно замены t на $-t$). Однако процесс нельзя считать полностью обратимым: с течением времени тепловые возмущения затухают и система приходит в состояние, характеризующееся постоянной температурой (по времени и пространству). Уравнение (1.106) отличается от известных уравнений классической и гиперболической теплопроводности [36, 38], однако в термодинамическом пределе оно точно описывает процессы распространения тепла в одномерном кристалле, а полученные на его основе решения могут быть использованы для описания термомеханических процессов в nanoструктурах и сверхчистых материалах [2, 3, 39].

Обобщение изложенного подхода на многомерный случай для быстрых тепловых процессов приводится в главе 2.

Глава 2

Быстрые тепловые процессы в гармонических кристаллах простой структуры

Произведено обобщение подхода, изложенного в первой главе на многомерный случай. Рассмотрены два быстрых тепловых процесса, происходящих в однородно нагретых гармонических кристаллах: 1) выравнивание кинетической и потенциальной энергий и 2) перераспределение кинетической энергии по пространственным направлениям. Выведены уравнения, описывающие оба процесса в двух- и трехмерном случаях. Получены аналитические решения данных уравнений для квадратной и треугольной решеток. Показано, что характерное время переходных процессов составляет порядка 10 периодов колебаний атомов. При переходе разность между кинетической и потенциальной энергиами совершают затухающие колебания. В треугольной решетке амплитуда этих колебаний убывает обратно пропорционально времени, в квадратной — корню из времени. Кинетическая энергия в общем случае неравномерно распределяется по пространственным направлениям. Иными словами, температура проявляет тензорные свойства. Кроме того, корреляции скоростей различных частиц отличны от ноля. Аналитические

выкладки подкреплены результатами численного моделирования. Показано, что полученные решения на малых временах с высокой точностью описывают переходные тепловые процессы в слабонелинейных кристаллах.

2.1. Уравнения динамики кристалла

Обобщим подход, изложенный в первой главе, на многомерный случай. При этом будем опираться на результаты, полученные в [40]. Ограничимся рассмотрением быстрых тепловых процессов в однородно нагретых кристаллах.

Рассмотрим бесконечную простую кристаллическую решетку, состоящую из одинаковых частиц, соединенных линейными пружинками. Для идентификации частиц будем использовать их радиус-векторы в недеформированном состоянии. Линеаризованное уравнение движения частицы с радиус-вектором \mathbf{r}

$$\dot{\mathbf{v}}(\mathbf{r}) = \omega_*^2 \sum_{\alpha} \mathbf{e}_{\alpha} \mathbf{e}_{\alpha} \cdot (\mathbf{u}(\mathbf{r} + \mathbf{a}_{\alpha}) - 2\mathbf{u}(\mathbf{r}) + \mathbf{u}(\mathbf{r} - \mathbf{a}_{\alpha})), \quad (2.1)$$

где $\mathbf{u}(\mathbf{r})$, $\mathbf{v}(\mathbf{r})$ — перемещение и скорость частицы с радиус-вектором \mathbf{r} ; \mathbf{a}_{α} — вектор, соединяющий две соседние частицы; $\mathbf{e}_{\alpha} = \mathbf{a}_{\alpha}/|\mathbf{a}_{\alpha}|$; $\omega_* = \sqrt{C/m}$ (C — жесткость связи; m — масса частицы).

Суммирование ведется по неколлинеарным направлениям связей α . В частности, в одномерной цепочке $\alpha = 1$, в квадратной решетке $\alpha = 1, 2$, в треугольной решетке $\alpha = 1, 2, 3$ (рис. 2.1).

Далее будем использовать следующую операторную запись уравнений движения:

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{v}}(\mathbf{r}) &= \mathcal{L} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}), & \mathcal{L} &= \omega_*^2 \sum_{\alpha} \mathbf{e}_{\alpha} \mathbf{e}_{\alpha} \Delta_{\alpha}^2, \\ \Delta_{\alpha}^2 \mathbf{u}(\mathbf{r}) &= \mathbf{u}(\mathbf{r} + \mathbf{a}_{\alpha}) - 2\mathbf{u}(\mathbf{r}) + \mathbf{u}(\mathbf{r} - \mathbf{a}_{\alpha}). \end{aligned} \quad (2.2)$$

Здесь \mathcal{L} — тензорный разностный оператор 2-го порядка. Таким образом, движение частиц описывается одним

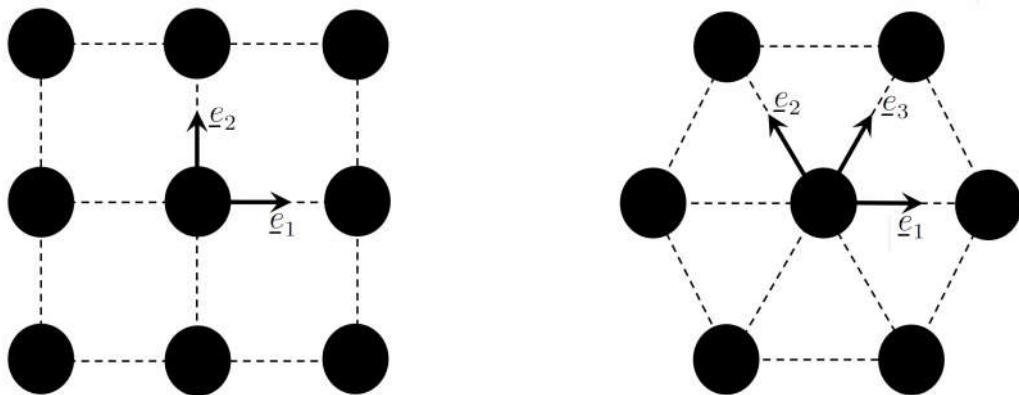


Рис. 2.1. Векторы \mathbf{e}_α для квадратной *слева* и треугольной *справа* решеток

дифференциально-разностным уравнением, которое эквивалентно системе обыкновенных дифференциальных уравнений.

В начальный момент времени перемещения и скорости частиц имеют вид

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}) = \mathbf{u}_0(\mathbf{r}); \quad \mathbf{v}(\mathbf{r}) = \mathbf{v}_0(\mathbf{r}), \quad (2.3)$$

где \mathbf{u}_0 , \mathbf{v}_0 — независимые случайные векторы с нулевым математическим ожиданием; здесь и далее индекс 0 — значение в начальный момент времени.

2.2. Случайные и детерминированные величины

Уравнение (2.2) с начальными условиями (2.3) полностью определяет динамику кристалла. В принципе оно может быть решено аналитически. При начальных условиях (2.3) получающиеся в результате решения перемещения и скорости частиц являются случайными величинами. Исследование характеристик движения отдельных частиц важно, например, при описании разрушения [41, 42]. При описании тепловых процессов больший интерес представляют не случайные движения отдельных частиц, а изменение статистических характеристик.

Следуя идеям, изложенным в первой главе, будем рассматривать множество реализаций одного и того же кристалла, отличающихся только случайными начальными условиями. Поведение данного множества описывается статистическими характеристиками, в качестве которых могут выступать *ковариации* (математические ожидания от произведения) скоростей и перемещений частиц. Введем ковариации для пары частиц i, j с радиус-векторами \mathbf{r}_i и \mathbf{r}_j :

$$\boldsymbol{\xi}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = \langle \mathbf{u}_i \mathbf{u}_j \rangle; \quad \boldsymbol{\kappa}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = \langle \mathbf{v}_i \mathbf{v}_j \rangle; \quad \boldsymbol{\nu}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = \langle \mathbf{u}_i \mathbf{v}_j \rangle, \quad (2.4)$$

где $\mathbf{u}_i = \mathbf{u}(\mathbf{r}_i)$; $\mathbf{v}_i = \mathbf{v}(\mathbf{r}_i)$.

Отметим, что в многомерном случае ковариации являются тензорными величинами. Здесь и далее скобки $\langle \rangle$ обозначают математическое ожидание. При этом считается, что скорости и перемещения являются центрированными случайными величинами: $\langle \mathbf{u}_i \rangle = 0$; $\langle \mathbf{v}_i \rangle = 0$.

Важно еще раз отметить, что в отличие от перемещений и скоростей частиц ковариации — детерминированные величины.

2.3. Уравнения динамики ковариаций

Получим замкнутую систему уравнений, описывающих динамику ковариаций. Ограничимся рассмотрением процессов, происходящих в однородно нагретом кристалле. В этом случае для ковариаций выполняются соотношения

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\xi}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) &= \boldsymbol{\xi}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j); & \boldsymbol{\kappa}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) &= \boldsymbol{\kappa}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j); \\ \boldsymbol{\nu}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) &= \boldsymbol{\nu}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j). \end{aligned} \quad (2.5)$$

Далее для краткости аргумент $\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$, как правило, будет опущен. Важно отметить, что множество точек, задаваемых векто-

рами $\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$, образует ту же решетку, что и частицы кристалла. Поэтому задачи для ковариаций решаются на той же решетке, что и уравнения движения (2.2).

Дифференцируя ковариации (2.4) по времени с учетом формул (2.2), (2.5), получим следующие уравнения динамики ковариаций:

- система уравнений 1-го порядка:

$$\begin{aligned}\dot{\boldsymbol{\xi}} &= \boldsymbol{\nu} + \boldsymbol{\nu}^*; \quad \dot{\boldsymbol{\kappa}} = \mathcal{L} \cdot \boldsymbol{\nu} + \boldsymbol{\nu}^* \cdot \mathcal{L}; \quad \dot{\boldsymbol{\nu}} = \boldsymbol{\kappa} + \boldsymbol{\xi} \cdot \mathcal{L}; \\ (\boldsymbol{\nu}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j))^* &= \boldsymbol{\nu}(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)^T;\end{aligned}\tag{2.6}$$

- система уравнений 2-го порядка для $\boldsymbol{\xi}$ и $\boldsymbol{\kappa}$:

$$\ddot{\boldsymbol{\xi}} = \mathcal{L} \cdot \boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{\xi} \cdot \mathcal{L} + 2\boldsymbol{\kappa}; \quad \ddot{\boldsymbol{\kappa}} = \mathcal{L} \cdot \boldsymbol{\kappa} + \boldsymbol{\kappa} \cdot \mathcal{L} + 2\mathcal{L} \cdot \boldsymbol{\xi} \cdot \mathcal{L}; \tag{2.7}$$

- система уравнений 2-го порядка для $\boldsymbol{\nu}$:

$$\ddot{\boldsymbol{\nu}} = \mathcal{L} \cdot \boldsymbol{\nu} + (\boldsymbol{\nu} + 2\boldsymbol{\nu}^*) \cdot \mathcal{L}; \quad \ddot{\boldsymbol{\nu}}^* = \mathcal{L} \cdot (\boldsymbol{\nu}^* + 2\boldsymbol{\nu}) + \boldsymbol{\nu}^* \cdot \mathcal{L}; \tag{2.8}$$

- уравнение 4-го порядка:

$$\ddot{\boldsymbol{\kappa}} - 2(\mathcal{L} \cdot \ddot{\boldsymbol{\kappa}} + \ddot{\boldsymbol{\kappa}} \cdot \mathcal{L}) + \mathcal{L}^2 \cdot \boldsymbol{\kappa} - 2\mathcal{L} \cdot \boldsymbol{\kappa} \cdot \mathcal{L} + \boldsymbol{\kappa} \cdot \mathcal{L}^2 = 0. \tag{2.9}$$

Здесь $\mathcal{L}^2 = \mathcal{L} \cdot \mathcal{L}$; $\boldsymbol{\nu}^T$ — транспонированный тензор $\boldsymbol{\nu}$. Отметим, что уравнению (2.9) также удовлетворяет ковариация перемещений $\boldsymbol{\xi}$. Уравнения (2.6) — (2.9) замкнутые, они позволяют определить значения всех ковариаций в любой момент времени.

Покажем, что для смешанной ковариации $\boldsymbol{\nu}$ выполняется несколько законов сохранения. Из уравнения (2.6) следует, что

$$\dot{\boldsymbol{\nu}} - \dot{\boldsymbol{\nu}}^* = \boldsymbol{\xi} \cdot \mathcal{L} - \mathcal{L} \cdot \boldsymbol{\xi}. \tag{2.10}$$

Умножая обе части уравнения (2.10) на \mathcal{L}^n , получим

$$\mathcal{L}^n \cdots (\boldsymbol{\nu} - \boldsymbol{\nu}^*) = \text{const}, \quad n = 0, 1, 2, \dots . \tag{2.11}$$

Здесь и далее $\mathcal{L}^0 = \mathbf{E}$, \mathbf{E} — единичный тензор. Из теоремы Гамильтона—Кэли следует, что количество независимых законов сохранения (2.11) равно размерности пространства.

Начальные условия к уравнениям (2.6) — (2.9) однозначно определяются начальными перемещениями и скоростями частиц. В частности, для уравнений (2.6) имеем начальные условия

$$\boldsymbol{\xi} = \left\langle \mathbf{u}_i^0 \mathbf{u}_j^0 \right\rangle; \quad \boldsymbol{\kappa} = \left\langle \mathbf{v}_i^0 \mathbf{v}_j^0 \right\rangle; \quad \boldsymbol{\nu} = \left\langle \mathbf{u}_i^0 \mathbf{v}_j^0 \right\rangle, \quad (2.12)$$

где \mathbf{u}_i^0 , \mathbf{v}_i^0 — начальные скорости и перемещения.

Важно отметить, что в отличие от начальных условий (2.3) для перемещений частиц условия (2.12) для ковариаций *детерминированные*.

Таким образом, рассмотрение множества реализаций и введение ковариаций позволяют перейти от задачи для перемещений со случайными начальными условиями (2.3) к задаче для ковариаций с детерминированными начальными условиями (2.12). При этом динамика ковариаций описывается уравнениями (2.6), (2.7), (2.8) или (2.9).

2.4. Обобщенные энергии

При описании тепловых процессов одной из основных величин является кинетическая температура T [43] или ее обобщение — тензорная температура \mathbf{T} [23, 25]:

$$k_B \mathbf{T}(\mathbf{r}_i) = m \left\langle \mathbf{v}_i \mathbf{v}_i \right\rangle = m \boldsymbol{\kappa}|_{i=j}; \quad T = \frac{1}{d} \operatorname{tr} \mathbf{T}, \quad (2.13)$$

где k_B — постоянная Больцмана; d — размерность пространства. В разделе 2.3 показано, что для получения замкнутой системы уравнений кинетической температуры недостаточно — необходимо рассмотрение ковариации скоростей различных частиц (см. формулу (2.9)).

В первой главе пособия на примере одномерного кристалла показано, что при описании тепловых процессов удобно рассматривать линейные комбинации ковариаций, имеющие смысл обобщенных энергий. Введем обобщенные (двухчастичные) кинетические **K** и потенциальные **P** энергии [8], определенные для пары частиц i, j :

$$\mathbf{K}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) = \frac{m}{2}\boldsymbol{\kappa}; \quad \mathbf{P}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) = -\frac{m}{4}(\mathcal{L} \cdot \boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{\xi} \cdot \mathcal{L}). \quad (2.14)$$

При $i = j$ следы тензоров **K**, **P** соответствуют обычным кинетической и потенциальной энергиям, приходящимся на частицу. Далее для краткости аргумент обобщенных энергий $\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$, как правило, будет опущен. Введем также обобщенную полную энергию **H** и обобщенный лагранжиан **L**:

$$\mathbf{H} = \mathbf{K} + \mathbf{P}; \quad \mathbf{L} = \mathbf{K} - \mathbf{P}. \quad (2.15)$$

В разделе 2.3 показано, что ковариации $\boldsymbol{\xi}$ и $\boldsymbol{\kappa}$ удовлетворяют уравнению (2.9), а следовательно, и обобщенные энергии **K**, **P**, **L**, **H**. Далее для краткости будем использовать операторную запись уравнения (2.9):

$$\begin{aligned} \mathfrak{L}\mathbf{g} &= 0, \quad \mathbf{g} = \{\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\kappa}, \mathbf{K}, \mathbf{P}, \mathbf{L}, \mathbf{H}\}; \\ \mathfrak{L}\mathbf{g} &= \ddot{\mathbf{g}} - 2(\mathcal{L} \cdot \ddot{\mathbf{g}} + \ddot{\mathbf{g}} \cdot \mathcal{L}) + \mathcal{L}^2 \cdot \mathbf{g} - 2\mathcal{L} \cdot \mathbf{g} \cdot \mathcal{L} + \mathbf{g} \cdot \mathcal{L}^2, \end{aligned} \quad (2.16)$$

где \mathfrak{L} — линейный дифференциально-разностный оператор.

Отметим, что уравнению (2.16) удовлетворяют симметричные и антисимметричные части тензоров $\boldsymbol{\xi}$, $\boldsymbol{\kappa}$, **K**, **P**, **L**, **H**¹.

В результате получаем, что ковариации и обобщенные энергии удовлетворяют уравнению (2.16). Начальные условия к уравнению (2.16) однозначно определяются начальными перемещениями и скоростями частиц (2.3).

¹Следовательно, симметричные и антисимметричные части обобщенных энергий могут рассматриваться независимо.

Покажем, что для обобщенной полной энергии \mathbf{H} выполняется несколько законов сохранения, аналогичных (2.11). Из системы уравнений (2.6) следует соотношение

$$\dot{\mathbf{H}} = \frac{m}{4} (\mathcal{L} \cdot (\boldsymbol{\nu} - \boldsymbol{\nu}^*) - (\boldsymbol{\nu} - \boldsymbol{\nu}^*) \cdot \mathcal{L}). \quad (2.17)$$

Умножая уравнение (2.17) на \mathcal{L}^n , получим законы сохранения:

$$\mathcal{L}^n \cdot \mathbf{H} = \text{const}, \quad n = 0, 1, 2, \dots . \quad (2.18)$$

При $n = 0$ и $i = j$ формула (2.18) дает закон сохранения энергии. Из теоремы Гамильтона — Кэли следует, что количество независимых законов (2.18) равно размерности пространства.

Таким образом, динамика обобщенных энергий определяется уравнением (2.16) с *детерминированными* начальными условиями. Для обобщенной полной энергии также выполняются законы сохранения (2.18), которые в разделе 2.5 используются для определения значений обобщенных энергий в стационарном состоянии.

2.5. Стационарное состояние

Численное решение уравнений динамики решетки (2.2) показывает, что после быстрого переходного процесса кристалл приходит в практически стационарное состояние. Стационарным называется состояние кристалла, в котором вторые производные по времени от ковариаций равны нолю. В данном разделе рассмотрена связь значений обобщенных энергий в стационарном состоянии с начальными условиями.

Отбрасывая производные по времени в уравнении (2.16), записанном для \mathbf{H} , и используя законы сохранения (2.18), получим замкнутую систему уравнений для определения стационарного

значения \mathbf{H} :

$$\begin{aligned} \text{tr } \mathbf{H} &= \text{tr } \mathbf{H}_0; \quad \mathcal{L} \cdot \cdot \mathbf{H} = \mathcal{L} \cdot \cdot \mathbf{H}_0; \quad \mathcal{L}^2 \cdot \cdot \mathbf{H} = \mathcal{L}^2 \cdot \cdot \mathbf{H}_0; \\ \mathcal{L}^2 \cdot \mathbf{H} - 2\mathcal{L} \cdot \mathbf{H} \cdot \mathcal{L} + \mathbf{H} \cdot \mathcal{L}^2 &= 0, \end{aligned} \quad (2.19)$$

где \mathbf{H}_0 — начальное значение обобщенной полной энергии.

Первое уравнение системы (2.19) определяет шаровую часть обобщенной полной энергии, а остальные — девиатор. Уравнения (2.19) могут быть решены аналитически, например с использованием дискретного преобразования Фурье (см. раздел 2.8.2).

Определим соотношение между обобщенными кинетической и потенциальной энергиями \mathbf{K} и $\mathbf{\Pi}$ в стационарном состоянии. Перепишем первое уравнение (2.7):

$$\frac{m}{4} \ddot{\xi} = \mathbf{L}. \quad (2.20)$$

Отбрасывая производную при переходе к стационарному состоянию, получим

$$\mathbf{L} = 0; \quad \mathbf{K} = \mathbf{\Pi} = \frac{1}{2} \mathbf{H}. \quad (2.21)$$

Из формул (2.21) следует, что при переходе к стационарному состоянию обобщенные кинетическая и потенциальная энергии выравниваются.

Первое уравнение системы (2.19) и уравнение (2.21) определяют следы обобщенных энергий:

$$\text{tr } \mathbf{K} = \text{tr } \mathbf{\Pi} = \frac{1}{2} \text{tr } \mathbf{H}_0. \quad (2.22)$$

При $i = j$ соотношение (2.22) означает равенство кинетической и потенциальной энергий в стационарном состоянии. Данный факт также может быть получен на основе теоремы о вири-але [44]. Девиаторы обобщенных энергий находят из решения

системы (2.19). Отметим, что система (2.19) справедлива как в двухмерном², так и в трехмерном случае.

Таким образом, в стационарном состоянии обобщенная кинетическая энергия равна обобщенной потенциальной энергии. Их значения связаны с начальными условиями уравнениями (2.19), (2.21) и (2.22). Решение этих уравнений для квадратной и треугольной решеток приведено ниже. В частности, в разделе 2.8.2 показано, что тензор температуры (2.13) в общем случае не является шаровым даже в стационарном состоянии.

2.6. Переход к стационарному состоянию

Из полученных ранее уравнений следует, что при переходе к стационарному состоянию реализуются два процесса. Во-первых, выравниваются кинетическая и потенциальная энергии. Данный процесс описывается уравнением (2.16). Во-вторых, может происходить перераспределение энергии по пространственным направлениям. Перераспределение происходит, например, в случае, когда кинетические энергии движений частиц по различным направлениям в начальный момент отличаются ($\langle v_x^2 \rangle \neq \langle v_y^2 \rangle$). Рассмотрим динамику данного переходного процесса.

Разность энергий, соответствующих различным пространственным направлениям, характеризуется величиной $\text{dev}\mathbf{H}$. Как было показано ранее, тензор \mathbf{H} удовлетворяет уравнению (2.16). Из закона сохранения (2.18) следует, что след \mathbf{H} не зависит от времени. Тогда легко показать, что девиатор \mathbf{H} также удовлетворяет уравнению (2.16):

$$\mathfrak{L}(\text{dev}\mathbf{H}) = 0. \quad (2.23)$$

Если начальные скорости и перемещения частиц заданы незави-

²В двухмерном случае, в силу теоремы Гамильтона—Кэли, третье уравнение системы (2.19) является следствием первых двух.

симо ($\nu = 0$), то начальные условия к уравнению (2.23) имеют вид

$$\begin{aligned} \text{dev}\mathbf{H} &= \text{dev}\mathbf{H}_0; & \text{dev}\dot{\mathbf{H}} &= 0; & \text{dev}\ddot{\mathbf{H}} &= 0; \\ \text{dev}\ddot{\mathbf{H}} &= -\frac{m}{4} (\mathcal{L}^2 \cdot \text{dev}\boldsymbol{\xi}_0 - 2\mathcal{L} \cdot \text{dev}\boldsymbol{\xi}_0 \cdot \mathcal{L} + \text{dev}\boldsymbol{\xi}_0 \cdot \mathcal{L}^2), \end{aligned} \quad (2.24)$$

где $\boldsymbol{\xi}_0$, \mathbf{H}_0 — начальные значения ковариации перемещений и обобщенной полной энергии.

Из формулы (2.24) следует, что на процесс перераспределения энергии по пространственным направлениям влияют величины $\text{dev}\mathbf{H}_0$ и $\text{dev}\boldsymbol{\xi}_0$, которые могут быть заданы независимо. Однако на значение $\text{dev}\mathbf{H}$ в стационарном состоянии влияет только $\text{dev}\mathbf{H}_0$ (см. формулы (2.19)).

Таким образом, при переходе к стационарному состоянию реализуются два процесса: выравнивание кинетической и потенциальной энергий и перераспределение энергии по направлениям. Данные процессы описываются одним уравнением (2.16), записанным для \mathbf{L} и $\text{dev}\mathbf{H}$ соответственно. Решение уравнения (2.16) для квадратной и треугольной решеток приведено далее. В частности, для треугольной решетки показано, что при больших временах решение уравнения (2.16) для $\text{dev}\mathbf{H}$ стремится к решению системы (2.19), описывающей стационарное состояние.

2.7. Квадратная решетка

Рассмотрим бесконечную квадратную решетку с базисными векторами \mathbf{e}_1 , \mathbf{e}_2 (см. рис. 2.1). Пусть в начальный момент времени частицы имеют независимые случайные скорости, а их перемещения равны нолю. При таких начальных условиях тензоры \mathbf{H} и \mathbf{L} симметричны³. Рассмотрим процесс перераспределения эн-

³Ранее отмечалось, что антисимметричные части тензоров \mathbf{H} и \mathbf{L} удовлетворяют уравнению (2.16). В рассматриваемом случае начальные условия для антисимметричных частей нулевые.

гии по пространственным направлениям и процесс выравнивания кинетической и потенциальной энергий.

Ранее было показано, что обобщенные энергии зависят от векторов $\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$. Точки, задаваемые данными векторами, образуют квадратную решетку. Для $\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$ будем использовать следующее представление:

$$\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j = a(k\mathbf{e}_1 + n\mathbf{e}_2), \quad (2.25)$$

где k, n — целые числа; a — равновесное расстояние.

Рассмотрим динамику обобщенной полной энергии \mathbf{H} . При этом ограничимся рассмотрением случая, когда компоненты начальных скоростей частиц по направлениям \mathbf{e}_1 и \mathbf{e}_2 независимы. Тогда для \mathbf{H} начальные условия

$$\begin{aligned} \mathbf{H} &= \mathbf{K}_0 = (K_1^0 \mathbf{e}_1 \mathbf{e}_1 + K_2^0 \mathbf{e}_2 \mathbf{e}_2) \delta_k \delta_n, \quad \mathbf{K}_0 = \frac{m}{2} \left\langle \mathbf{v}_i^0 \mathbf{v}_i^0 \right\rangle; \\ \dot{\mathbf{H}} &= 0; \quad \ddot{\mathbf{H}} = 0; \quad \dddot{\mathbf{H}} = 0, \end{aligned} \quad (2.26)$$

где δ_n — функция, равная единице при $n = 0$ и равная нулю во всех остальных случаях.

Изменение \mathbf{H} при переходе к стационарному состоянию описывается уравнением (2.9), где оператор \mathcal{L} имеет вид

$$\mathcal{L} = \omega_*^2 (\Delta_1^2 \mathbf{e}_1 \mathbf{e}_1 + \Delta_2^2 \mathbf{e}_2 \mathbf{e}_2). \quad (2.27)$$

С учетом представления (2.27) уравнение (2.9) распадается на независимые скалярные уравнения относительно $H_{ij} = \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{H} \cdot \mathbf{e}_j$:

$$\begin{aligned} \ddot{H}_{11} - 4\omega_*^2 \Delta_1^2 \ddot{H}_{11} &= 0; & \ddot{H}_{22} - 4\omega_*^2 \Delta_2^2 \ddot{H}_{22} &= 0; \\ \ddot{H}_{12} - 2\omega_*^2 (\Delta_1^2 + \Delta_2^2) \ddot{H}_{12} + \omega_*^4 (\Delta_1^2 - \Delta_2^2)^2 H_{12} &= 0. \end{aligned} \quad (2.28)$$

Видно, что компоненты тензора обобщенной полной энергии \mathbf{H} меняются независимо. Следовательно, в квадратной решетке перераспределение энергии по пространственным направлениям не

происходит. В частности, при начальных условиях (2.26) уравнения (2.28) имеют решение $\mathbf{H} = \mathbf{K}_0$, следовательно, обобщенная полная энергия сохраняется.

Теперь рассмотрим процесс выравнивания кинетической и потенциальной энергий. Для обобщенного лагранжиана \mathbf{L} начальные условия

$$\begin{aligned}\mathbf{L} &= \mathbf{K}_0; \quad \dot{\mathbf{L}} = 0; \quad \ddot{\mathbf{L}} = 2(\mathcal{L} \cdot \mathbf{K}_0 + \mathbf{K}_0 \cdot \mathcal{L}); \\ \ddot{\mathbf{L}} &= 0.\end{aligned}\tag{2.29}$$

Легко показать, что компоненты $L_{ij} = \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{L} \cdot \mathbf{e}_j$ обобщенного лагранжиана удовлетворяют уравнениям (2.28). При начальных условиях (2.29) уравнение для L_{12} имеет тривиальное решение. Уравнения для L_{11} и L_{22} переписывают в виде

$$\ddot{L}_{11} - 4\omega_*^2 \Delta_1^2 L_{11} = 0; \quad \ddot{L}_{22} - 4\omega_*^2 \Delta_2^2 L_{22} = 0.\tag{2.30}$$

Уравнения (2.30) аналогичны уравнению динамики лагранжиана в гармонической цепочке, полученному в [33]. Решение уравнений (2.30) с начальными условиями (2.29) имеет вид [33]

$$\mathbf{L} = K_1^0 J_{2k}(4\omega_* t) \delta_n \mathbf{e}_1 \mathbf{e}_1 + K_2^0 J_{2n}(4\omega_* t) \delta_k \mathbf{e}_2 \mathbf{e}_2,\tag{2.31}$$

где J — функция Бесселя первого рода.

Применяя асимптотические формулы для функции Бесселя, легко показать, что обобщенный лагранжиан совершает затухающие колебания с амплитудой, обратно пропорциональной корню из времени. Тогда, учитывая сохранение обобщенной полной энергии $\mathbf{H} = \mathbf{K}_0$, в стационарном состоянии имеем

$$\mathbf{K} = \boldsymbol{\Pi} = \frac{1}{2} \mathbf{K}_0.\tag{2.32}$$

Из формул (2.13), (2.32) следует, что тензор температуры в стационарном состоянии шаровой, только если начальные скорости

равномерно распределены по направлениям (тензор \mathbf{K}_0 шаровой).

Таким образом, в квадратной решетке кинетические и потенциальные энергии, соответствующие одному направлению, выравниваются по тому же закону, что и в одномерной цепочке [33]. Перераспределение энергии по направлениям не происходит. Тензор температуры (2.13) не шаровой.

2.8. Треугольная решетка

2.8.1. Общие соотношения

Рассмотрим переходные тепловые процессы в треугольной решетке (см. рис. 2.1). Как отмечалось ранее, обобщенные энергии зависят от векторов $\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$. Множество точек, задаваемых векторами $\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$, также образует треугольную решетку. Далее все аналитические решения строятся для ячейки периодичности, имеющей форму ромба. Точки, принадлежащие ромбу, нумеруются парой индексов k, n :

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j &= a(k\mathbf{e}_1 + n\mathbf{e}_2), \quad k, n = -N, \dots, N, \\ \mathbf{e}_1 &= \mathbf{i}, \quad \mathbf{e}_2 = -\frac{1}{2}\mathbf{i} + \frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{j}; \quad \mathbf{e}_3 = \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2, \end{aligned} \tag{2.33}$$

где $2N + 1$ — число точек вдоль одной из сторон ячейки периодичности; a — равновесное состояние; \mathbf{i}, \mathbf{j} — орты декартового базиса; векторы $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$ показаны на рис. 2.1.

В точке ромба с индексами k, n заданы обобщенные энергии $\mathbf{K}_{k,n}, \mathbf{\Pi}_{k,n}$. В [45] показано, что такая нумерация частиц удобна для аналитического решения задач для треугольной решетки.

Обобщенные энергии определяются из решения разностных уравнений (2.19) и дифференциально-разностных уравнений (2.16), (2.23). Для решения используется дискретное преоб-

разование Фурье. Прямое и обратное дискретное преобразование Фурье, например, для обобщенной полной энергии $\mathbf{H}_{k,n} = \mathbf{H}(a(k\mathbf{e}_1 + n\mathbf{e}_2))$ определяется формулами

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{H}}_{s,p} &= \mathcal{F}(\mathbf{H}_{k,n}) = \sum_{k,n=-N}^N \mathbf{H}_{k,n} e^{-2i(\theta_s k + \theta_p n)}, \quad \theta_s = \frac{\pi s}{2N+1}, \\ \mathbf{H}_{k,n} &= \mathcal{F}^{-1}(\hat{\mathbf{H}}_{s,p}) = \frac{1}{(2N+1)^2} \sum_{s,p=-N}^N \hat{\mathbf{H}}_{s,p} e^{2i(\theta_s k + \theta_p n)}.\end{aligned}\tag{2.34}$$

Здесь и далее фурье-образ обозначается символом “ $\hat{}$ ”, индексы k, n и s, p у обобщенных энергий и их образов для краткости будут опущены.

Решения, получаемые с использованием дискретного преобразования Фурье (2.34), описывают процессы, происходящие в конечных кристаллах при периодических граничных условиях. Бесконечный кристалл получают предельным переходом $N \rightarrow \infty$.

2.8.2. Стационарное состояние. Тензорная температура

Вычислим стационарные значения обобщенных энергий \mathbf{K} , $\mathbf{\Pi}$ и тензорной температуры (2.13) в треугольной решетке. Их следы определяются формулой (2.22), а девиаторы выражаются через $\text{dev}\mathbf{H}$:

$$\text{dev}\mathbf{K} = \text{dev}\mathbf{\Pi} = \frac{1}{2}\text{dev}\mathbf{H}.\tag{2.35}$$

Следовательно, задача сводится к определению $\text{dev}\mathbf{H}$ из системы разностных уравнений (2.19). Для решения системы (2.19) будем использовать соотношение

$$\mathcal{L} \cdot \mathbf{H} = \mathbf{H} \cdot \mathcal{L}.\tag{2.36}$$

Легко проверить, что соотношение (2.36) является по крайней мере частным решением последнего уравнения (2.19). Сравнение с численным решением уравнений динамики решетки (2.2) показывает, что формула (2.36) приводит к корректным результатам.

Представим девиаторы тензоров \mathbf{H} , \mathbf{H}_0 во введенном декартовом базисе \mathbf{i}, \mathbf{j} :

$$\text{dev}\mathbf{H}_0 = H_1^0(\mathbf{ii} - \mathbf{jj}) + H_2^0(\mathbf{ij} + \mathbf{ji}); \quad \text{dev}\mathbf{H} = H_1(\mathbf{ii} - \mathbf{jj}) + H_2(\mathbf{ij} + \mathbf{ji}). \quad (2.37)$$

Применим дискретное преобразование Фурье (2.34) к системе уравнений (2.19) с учетом формул (2.36) и (2.37). Проецируя получившиеся уравнения для образов на \mathbf{i}, \mathbf{j} , получим

$$\begin{aligned} A_{s,p}(\hat{H}_1 - \hat{H}_1^0) + B_{s,p}(\hat{H}_2 - \hat{H}_2^0) &= 0; \quad B_{s,p}\hat{H}_1 = A_{s,p}\hat{H}_2, \\ A_{s,p} &= 2\omega_*^2 (\sin^2 \theta_p + \sin^2(\theta_s + \theta_p) - 2 \sin^2 \theta_s), \\ B_{s,p} &= 2\sqrt{3}\omega_*^2 (\sin^2 \theta_p - \sin^2(\theta_s + \theta_p)). \end{aligned} \quad (2.38)$$

Решая систему (2.38) относительно \hat{H}_1, \hat{H}_2 и применяя обратное преобразование Фурье, получим

$$\begin{aligned} \text{dev}\mathbf{H} &= H_1(\mathbf{ii} - \mathbf{jj}) + H_2(\mathbf{ij} + \mathbf{ji}), \\ H_1 &= \frac{1}{(2N+1)^2} \sum_{s,p=-N}^N \frac{A_{s,p}^2 \hat{H}_1^0 + A_{s,p} B_{s,p} \hat{H}_2^0}{A_{s,p}^2 + B_{s,p}^2} \cos(2\theta_s k + 2\theta_p n), \\ H_2 &= \frac{1}{(2N+1)^2} \sum_{s,p=-N}^N \frac{A_{s,p} B_{s,p} \hat{H}_1^0 + B_{s,p}^2 \hat{H}_2^0}{A_{s,p}^2 + B_{s,p}^2} \cos(2\theta_s k + 2\theta_p n), \end{aligned} \quad (2.39)$$

где θ_s, θ_p определены формулой (2.34).

В термодинамическом пределе ($N \rightarrow \infty$) суммы в формуле (2.39) превращаются в интегралы. Решение (2.39) получено

при произвольных начальных условиях. Видно, что в общем случае $\text{dev}\mathbf{H} \neq 0$, следовательно, энергия распределяется по направлениям неравномерно.

Рассмотрим случай, когда в начальный момент времени частицы имеют независимые случайные скорости и нулевые перемещения. При этом $\mathbf{H}_0 = \mathbf{K}_0\delta_k\delta_n$, где $\mathbf{K}_0 = \frac{m}{2}\langle \mathbf{v}_i^0 \mathbf{v}_i^0 \rangle$. Можно показать, что для бесконечного кристалла выполняются тождества

$$\begin{aligned} N \rightarrow \infty : \quad & \sum_{s,p=-N}^N \frac{A_{s,p}^2}{A_{s,p}^2 + B_{s,p}^2} = \sum_{s,p=-N}^N \frac{B_{s,p}^2}{A_{s,p}^2 + B_{s,p}^2}; \\ & \sum_{s,p=-N}^N \frac{A_{s,p}B_{s,p}}{A_{s,p}^2 + B_{s,p}^2} = 0. \end{aligned} \quad (2.40)$$

Подставляя \mathbf{H}_0 в решение (2.39) и используя тождества (2.40), получим

$$k = n = 0 : \quad \text{dev}\mathbf{H} = \frac{1}{2}\text{dev}\mathbf{K}_0; \quad \text{dev}\mathbf{K} = \frac{1}{4}\text{dev}\mathbf{K}_0. \quad (2.41)$$

Из формулы (2.41) следует, что в гармонической треугольной решетке равное распределение кинетической энергии по направлениям не происходит. Если проекции начальных скоростей частиц на оси x и y не коррелируют, то из формулы (2.41) следует простое выражение для компонент тензора температуры (2.13):

$$T_{xx} - T_{yy} = \frac{1}{4} (T_{xx}^0 - T_{yy}^0), \quad (2.42)$$

где $T_{xx} = \mathbf{i} \cdot \mathbf{T} \cdot \mathbf{i}$; $T_{yy} = \mathbf{j} \cdot \mathbf{T} \cdot \mathbf{j}$; T_{xx}^0, T_{yy}^0 — начальные значения T_{xx}, T_{yy} .

Следовательно, тензор температуры (2.13) не шаровой даже в стационарном состоянии.

Рассмотрим ковариацию скоростей различных частиц в стационарном состоянии:

$$\langle \mathbf{v}(\mathbf{r})\mathbf{v}(\mathbf{r} + k\mathbf{a}_\alpha) \rangle = \frac{2}{m}\mathbf{K}(k\mathbf{a}_\alpha). \quad (2.43)$$

В одномерном случае [33] данная ковариация равна нолю для всех значений $k > 0$. В двухмерном случае в силу формулы (2.22) равны нулю только шаровые части тензоров (2.43). Девиаторы тензоров (2.43) отличны от нуля. Они вычисляются на основе формул (2.14), (2.35) и (2.39). Анализ формулы (2.39) показывает, что ковариация скоростей убывает обратно пропорционально квадрату расстояния между частицами. Кроме того, норма⁴ $\|\text{dev}\mathbf{K}(k\mathbf{a}_\alpha)\|$ не зависит от направления α .

Для проверки проведем сравнение аналитического решения (2.39) с результатами численного решения уравнений динамики решетки (2.2). Здесь и далее для численного решения используется метод Верле с шагом интегрирования $5 \cdot 10^{-3}\tau_*$, где $\tau_* = 2\pi/\omega_*$. Решение проводится при периодических граничных условиях. Ячейка периодичности содержит 10^6 частиц. В начальный момент времени частицы имеют независимые случайные скорости, направленные вдоль одного из базисных векторов, и нулевые перемещения. Сравнение численного решения уравнений динамики решетки (2.2) с аналитическим решением (2.39) представлено на рис. 2.2. Видно, что решения практически неотличимы.

Таким образом, полученное аналитическое решение показывает, что в гармонических кристаллах тензор температуры не шаровой ($T_{xx} \neq T_{yy}$). Кроме того, ковариация скоростей соседних частиц $\langle \mathbf{v}_i \mathbf{v}_j \rangle$ не равна нолю. Иными словами, скорости частиц не являются статистически независимыми.

⁴Здесь используется норма $\|\mathbf{X}\| = \mathbf{X} \cdot \cdot \mathbf{X}$.

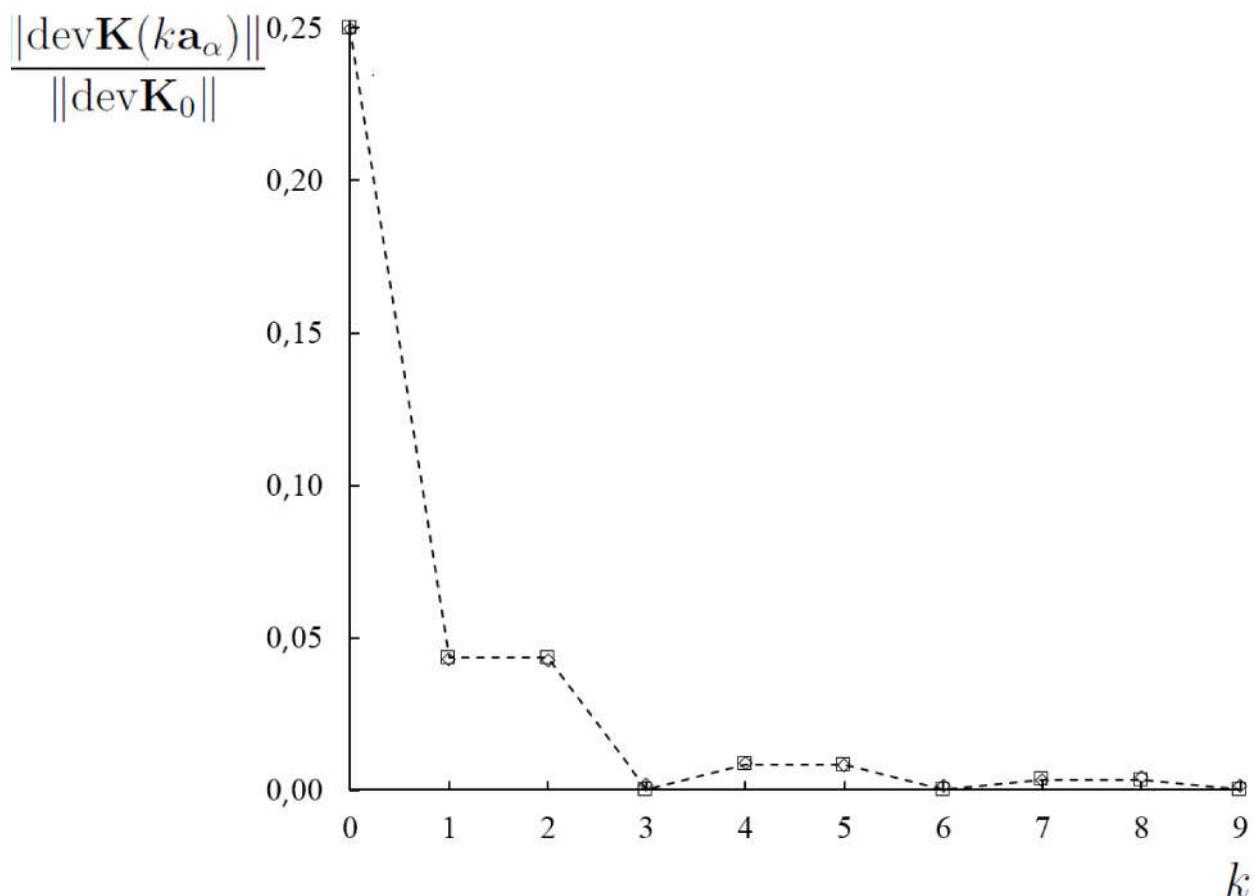


Рис. 2.2. Обобщенная кинетическая энергия в стационарном состоянии для треугольной решетки (величина $\|\text{devK}(ka_\alpha)\|$ пропорциональна ковариации скоростей частиц, находящихся на расстоянии ka , где a — равновесное расстояние (см. формулу (2.43)); линия соединяет точки, полученные на основе формулы (2.39) при $N = 150$; круги и квадраты — численное решение уравнений динамики решетки (2.2) ($\alpha = 1, 2$)

2.8.3. Перераспределение энергии по пространственным направлениям

В разделе 2.6 показано, что перераспределение энергии по пространственным направлениям для devH описывается уравнением (2.23). Приведем решение уравнения (2.23) для треугольной решетки.

Пусть в начальный момент времени частицы имеют независимые случайные скорости и нулевые перемещения. Ограничимся

рассмотрением случая, когда компоненты скорости по направлениям \mathbf{i} и \mathbf{j} независимы. Тогда начальные условия

$$\operatorname{dev} \mathbf{H} = \operatorname{dev} \mathbf{H}_0 = H_1^0 (\mathbf{ii} - \mathbf{jj}) \delta_k \delta_n; \quad \dot{\mathbf{H}} = 0; \quad \ddot{\mathbf{H}} = 0; \quad \dddot{\mathbf{H}} = 0. \quad (2.44)$$

Рассмотрим преобразование Фурье от уравнения (2.23):

$$\begin{aligned} & \operatorname{dev} \ddot{\hat{\mathbf{H}}} - 2 \left(\hat{\mathcal{L}} \cdot \operatorname{dev} \ddot{\hat{\mathbf{H}}} + \operatorname{dev} \ddot{\hat{\mathbf{H}}} \cdot \hat{\mathcal{L}} \right) + \hat{\mathcal{L}}^2 \cdot \operatorname{dev} \hat{\mathbf{H}} - 2 \hat{\mathcal{L}} \cdot \operatorname{dev} \hat{\mathbf{H}} \cdot \hat{\mathcal{L}} + \\ & + \operatorname{dev} \hat{\mathbf{H}} \cdot \hat{\mathcal{L}}^2 = 0, \\ & \hat{\mathcal{L}} = -4\omega_*^2 \left(\sin^2 \theta_s \mathbf{e}_1 \mathbf{e}_1 + \sin^2 \theta_p \mathbf{e}_2 \mathbf{e}_2 + \sin^2(\theta_s + \theta_p) \mathbf{e}_3 \mathbf{e}_3 \right). \end{aligned} \quad (2.45)$$

Для тензора $\operatorname{dev} \hat{\mathbf{H}}$ будем использовать представление в декартовом базисе (2.37). Компоненты \hat{H}_1, \hat{H}_2 тензора $\operatorname{dev} \hat{\mathbf{H}}$ связаны первым уравнением системы (2.38)⁵. Умножая уравнения (2.45) на $\mathbf{ii} - \mathbf{jj}$ с учетом соотношения (2.38), получим уравнение для \hat{H}_1 с соответствующими начальными условиями:

$$\begin{aligned} & \ddot{\hat{H}}_1 - 2 \operatorname{tr} \hat{\mathcal{L}} \ddot{\hat{H}}_1 + (A_{s,p}^2 + B_{s,p}^2) \hat{H}_1 - A_{s,p}^2 H_1^0 = 0; \\ & t = 0 : \quad \hat{H}_1 = H_1^0; \quad \dot{\hat{H}}_1 = 0; \quad \ddot{\hat{H}}_1 = 0; \quad \dddot{\hat{H}}_1 = 0, \end{aligned} \quad (2.46)$$

где $A_{s,p}, B_{s,p}$ определены формулой (2.39).

Решая уравнение (2.46) и применяя обратное преобразование Фурье, определим H_1 . Выражение для H_2 можно получить, используя первое уравнение системы (2.38). В частности, можно показать, что $H_2 = 0$ при $k = n = 0$. В результате для $k = n = 0$

⁵ Данная формула следует из закона сохранения (2.18).

имеем

$$\begin{aligned} \text{dev}\mathbf{H} &= \text{dev}\mathbf{H}_0 \left[1 - \frac{2}{(2N+1)^2} \sum_{s,p=-N}^N \frac{B_{s,p}^2}{(A_{s,p}^2 + B_{s,p}^2)(\Omega_+^2 - \Omega_-^2)} \right. \\ &\quad \left. \left(\Omega_+^2 \sin^2 \frac{\Omega_- t}{2} - \Omega_-^2 \sin^2 \frac{\Omega_+ t}{2} \right) \right], \\ \Omega_{\pm} &= 2\omega_* \left(\sin^2 \theta_s + \sin^2 \theta_p + \sin^2(\theta_s + \theta_p) \pm \sqrt{3} (\sin^2 \theta_s \sin^2 \theta_p + \right. \\ &\quad \left. + (\sin^2 \theta_s + \sin^2 \theta_p) \sin^2(\theta_s + \theta_p))^{1/2} \right)^{1/2}. \end{aligned} \tag{2.47}$$

Сравнение аналитического решения (2.47) с численным решением уравнений динамики решетки (2.2) представлено на рис. 2.3. В масштабе графика решения совпадают. Видно, что со временем разница между энергиями, соответствующими направлениям x и y , уменьшается в два раза по отношению к начальной. Данный результат совпадает с решением стационарной задачи (2.41), согласно которому $\text{dev}\mathbf{H} = \frac{1}{2}\text{dev}\mathbf{H}_0$.

Таким образом, процесс перераспределения энергии по пространственным направлениям в треугольной решетке со случайными начальными скоростями и нулевыми перемещениями описывается формулой (2.47).

С течением времени система стремится к стационарному состоянию, в котором выполняются соотношения (2.41). Характерное время переходного процесса составляет порядка 10 периодов колебаний атомов τ_* (см. рис. 2.3).

2.8.4. Выравнивание кинетической и потенциальной энергий

Рассмотрим процесс выравнивания кинетической и потенциальной энергий. Выравнивание описывается уравнением (2.16) от-

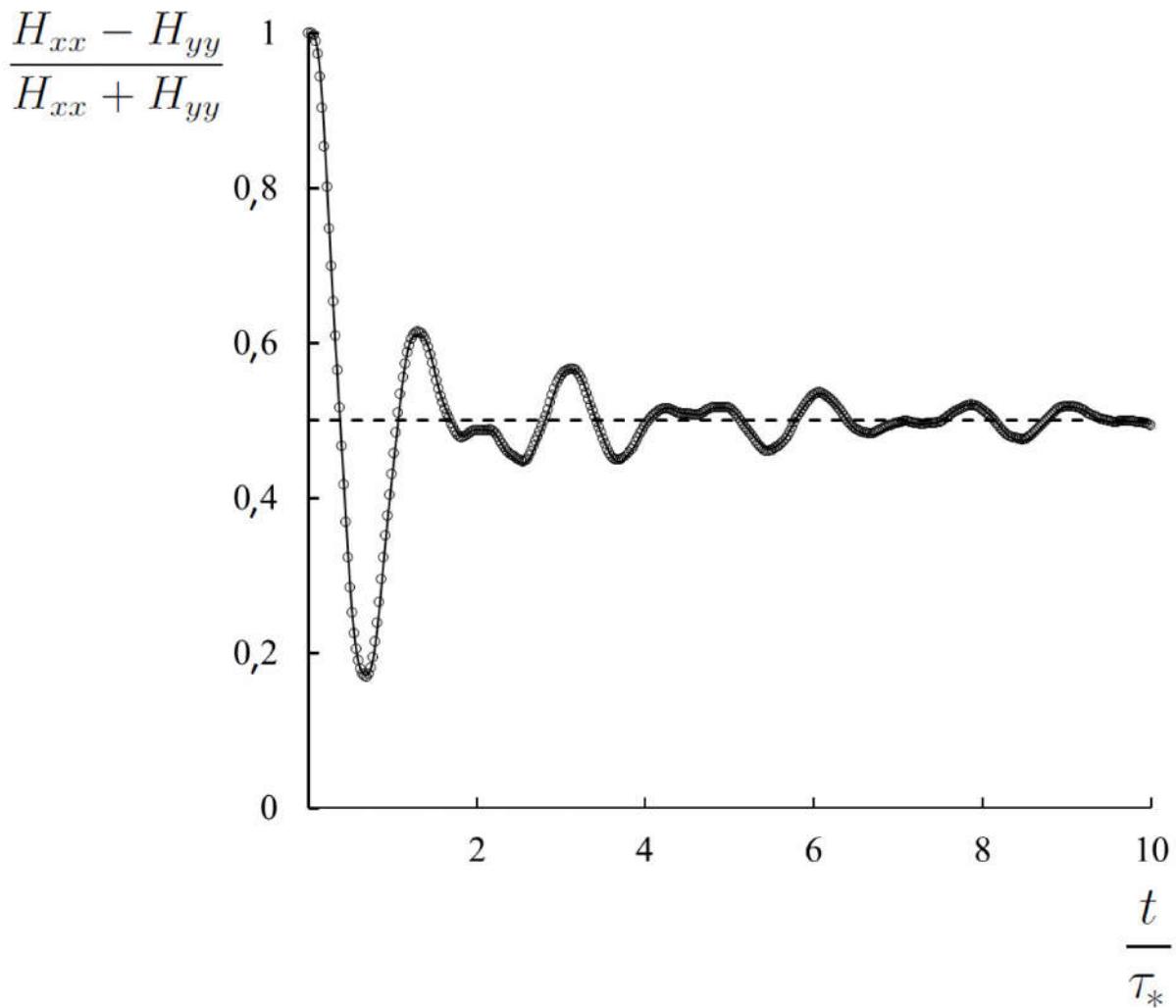


Рис. 2.3. Перераспределение энергий по пространственным направлениям в гармонической треугольной решетке: H_{xx} , H_{yy} — компоненты тензора обобщенной полной энергии $\mathbf{H}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$ при $i = j$; линия — аналитическое решение (2.45); кружок — численное решение уравнений динамики решетки (2.2); пунктируя линия — аналитическое решение (2.41) стационарной задачи

носительно обобщенного лагранжиана \mathbf{L} . Предположим, что в начальный момент времени частицы имеют независимые случайные скорости, равномерно распределенные по направлениям, и нулевые перемещения. Тогда для уравнения (2.16) начальные условия имеют вид

$$\mathbf{L} = \frac{K_0}{2} \delta_k \delta_n \mathbf{E}; \quad \dot{\mathbf{L}} = 0; \quad \ddot{\mathbf{L}} = 4\mathcal{L} \cdot \mathbf{L}; \quad \dddot{\mathbf{L}} = 0, \quad (2.48)$$

где K_0 — начальное значение кинетической энергии; \mathbf{E} — единичный тензор.

Для решения (2.16) воспользуемся предположением $\mathcal{L} \cdot \mathbf{L} = \mathbf{L} \cdot \mathcal{L}$. Тогда с учетом начальных условий (2.48) уравнение (2.16) приводится к виду

$$\ddot{\mathbf{L}} = 4\mathcal{L} \cdot \mathbf{L}. \quad (2.49)$$

Видим, что введенное предположение позволяет существенно упростить уравнение (2.48). Сравнение с численным решением уравнений динамики решетки (2.2) показывает, что уравнение (2.49) корректно описывает динамику лагранжиана $L = \text{tr } \mathbf{L}|_{i=j}$. Уравнение (2.49) равносильно системе трех независимых уравнений относительно векторов $\mathbf{L}_i = \mathbf{L} \cdot \mathbf{e}_i$:

$$\ddot{\mathbf{L}}_i = 4\mathcal{L} \cdot \mathbf{L}_i, \quad i = 1, 2, 3. \quad (2.50)$$

Для \mathbf{L}_i начальные условия

$$\mathbf{L}_i = \frac{K_0}{2} \delta_k \delta_n \mathbf{e}_i, \quad \dot{\mathbf{L}}_i = 0. \quad (2.51)$$

Уравнение (2.50) с начальными условиями (2.51) имеет простую механическую аналогию. Задача о нахождении компонент \mathbf{L}_i обобщенного лагранжиана эквивалентна задаче о колебаниях треугольной решетки, в которой в начальный момент времени одна частица имеет ненулевое перемещение, а скорости и перемещения остальных частиц равны нолю. Решение данной механической задачи представлено в приложении Приложение 4. Используя аналогию, для лагранжиана $L = \text{tr } \mathbf{L}|_{i=j}$ получим

$$\begin{aligned} L(t) &= \frac{K_0}{2(2N+1)^2} \sum_{s,p=-N}^N (\cos(2\Omega_1 t) + \cos(2\Omega_2 t)); \\ &\Omega_j^4 - 4\omega_*^2 \Omega_j^2 (\sin^2 \theta_s + \sin^2 \theta_p + \sin^2(\theta_s + \theta_p)) \\ &+ 12\omega_*^4 (\sin^2(\theta_s + \theta_p) \sin^2 \theta_s + \\ &+ \sin^2(\theta_s + \theta_p) \sin^2 \theta_p + \sin^2 \theta_s \sin^2 \theta_p) = 0, \quad j = 1, 2. \end{aligned} \quad (2.52)$$

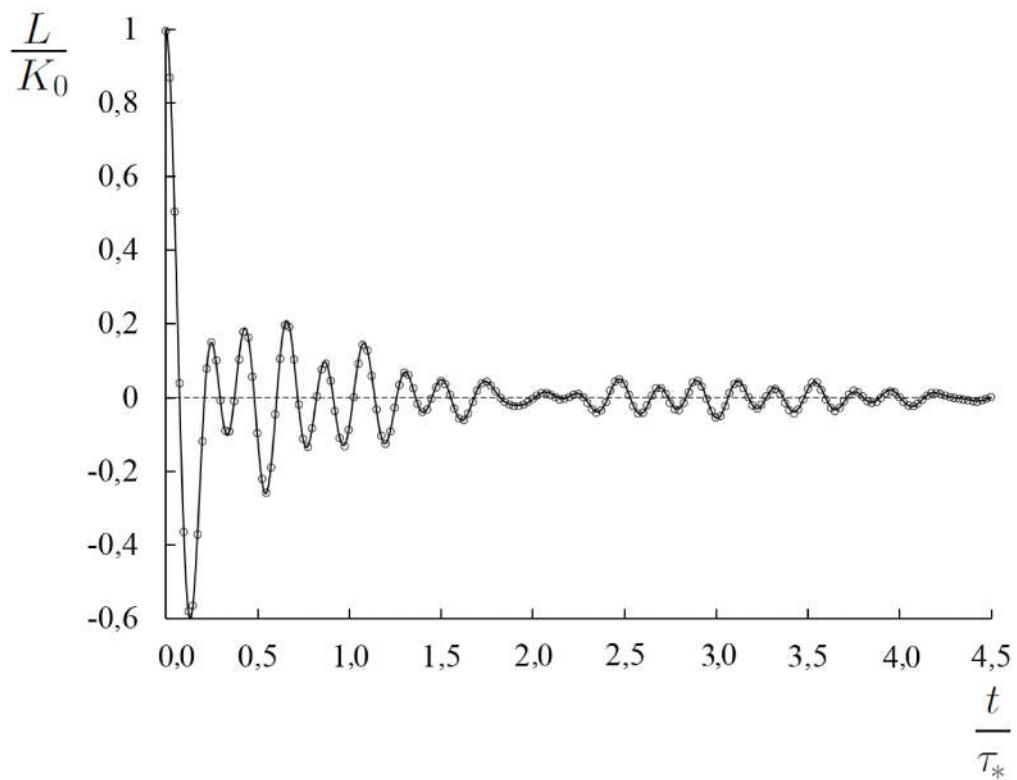


Рис. 2.4. Выравнивание кинетической и потенциальной энергий в гармонической треугольной решетке со случайными начальными скоростями: линия — аналитическое решение (2.52); кружок — численное решение уравнений динамики решетки (2.2)

Вторая формула (2.52) соответствует дисперсионному соотношению для треугольной решетки [46].

Для проверки формулы (2.52) проводилось численное решение уравнений динамики решетки (2.2). Для численного интегрирования использовался метод Верле с шагом интегрирования $\tau = 10^{-3}\tau_*$. На рис. 2.4 представлен процесс выравнивания кинетической и потенциальной энергий. Видим, что аналитическое решение (2.52) в масштабе рисунка неотличимо от результатов численного решения уравнений динамики решетки.

Анализ формулы (2.52) показывает, что лагранжиан совершает затухающие колебания с амплитудой, обратно пропорциональной времени. Это существенное отличие от квадратной решетки, где лагранжиан затухает обратно пропорционально кор-

нию из времени (см. раздел 2.7). За время порядка $10\tau_*$ разность между кинетической и потенциальной энергиями уменьшается на два порядка.

2.8.5. Вычисление ковариации перемещений в задачах о тепловом расширении

В [47, 48] показано, что ковариация перемещений играет важную роль при описании теплового расширения кристаллов. В частности, коэффициент теплового расширения для треугольной решетки существенно зависит от соотношения между компонентами следующего тензора в стационарном состоянии:

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= \left\langle (\mathbf{u}(\mathbf{r} + \mathbf{a}_\alpha) - \mathbf{u}(\mathbf{r})) (\mathbf{u}(\mathbf{r} + \mathbf{a}_\alpha) - \mathbf{u}(\mathbf{r})) \right\rangle = \\ &= 2\xi(0) - \xi(\mathbf{a}_\alpha) - \xi(-\mathbf{a}_\alpha). \end{aligned} \quad (2.53)$$

Без потери общности будем рассматривать случай $\alpha = 1$. Тогда компоненты $A_{xx} = \mathbf{i} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{i}$ и $A_{yy} = \mathbf{j} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{j}$ тензора \mathbf{A} в декартовом базисе (2.33) характеризуют продольные и поперечные деформации связи, вызванные тепловым движением частиц. В [48] показано, что коэффициент теплового расширения треугольной решетки зависит от отношения A_{yy}/A_{xx} .

Вычислим тензор \mathbf{A} в рамках рассматриваемой модели гармонического кристалла. Для этого определим ковариацию перемещений на основе численного решения системы уравнений (2.7). Как и ранее, уравнения решаются для ячейки периодичности в форме ромба (см. формулу (2.33)). Используются следующие начальные условия:

$$\xi = 0; \quad \dot{\xi} = 0; \quad \kappa = \kappa_0 \delta_k \delta_n \mathbf{E}; \quad \dot{\kappa} = 0. \quad (2.54)$$

При этом значение κ_0 не влияет на отношение A_{yy}/A_{xx} . Для численного решения уравнений (2.7) используется алгоритм Верле

с шагом по времени $10^{-3}\tau_*$. В результате решения получают следующее соотношение между компонентами тензора \mathbf{A} :

$$\frac{A_{yy}}{A_{xx}} \approx 1,43. \quad (2.55)$$

Формула (2.55) хорошо согласуется с результатами молекулярно-динамического моделирования, проведенного для кристалла Леннарда–Джонса в [48], где было получено $A_{yy}/A_{xx} \approx 1,435$.

Таким образом, подход, рассмотренный в данном пособии, может использоваться в том числе и при описании теплового расширения кристаллов.

2.9. Влияние нелинейности

Исследуем влияние малой нелинейности на два быстрых переходных процесса: 1) выравнивание кинетической и потенциальной энергий, 2) перераспределение энергии по пространственным направлениям.

Рассмотрим треугольную решетку, частицы в которой взаимодействуют посредством потенциала Леннарда-Джонса:

$$\Pi(r) = \varepsilon \left[\left(\frac{a}{r}\right)^{12} - 2 \left(\frac{a}{r}\right)^6 \right], \quad (2.56)$$

где ε — энергия связи; a — равновесное расстояние.

Учитываются только взаимодействия ближайших соседей. Моделирование проводится при периодических граничных условиях. В начальный момент времени частицам сообщаются независимые случайные скорости, равномерно распределенные в круге радиуса v_0 . В качестве масштаба скорости используется скорость диссоциации $v_d = \sqrt{2\varepsilon/m}$. Начальные перемещения частиц равны нолю.

Варьируя амплитуду начальных скоростей частиц (температуру), можно изменять степень влияния нелинейности на поведение системы. Покажем, что при малых скоростях частиц (низких температурах) переходные тепловые процессы в кристалле Леннарда—Джонса хорошо описываются гармонической моделью.

Рассмотрим сначала влияние нелинейности на выравнивание кинетической и потенциальной энергий. Зависимость лагранжиана от времени, полученная в результате молекулярно-динамического моделирования, представлена на рис. 2.5. Видим, что при переходе к стационарному состоянию кинетическая и потенциальная энергии выравниваются. При $v_0 = 0,05v_d$ зависимость $L(t)$ в рассматриваемом временном интервале в пределах толщины линии совпадает с аналитическим решением для гармонического кристалла (2.52). При увеличении амплитуды начальных скоростей частиц влияние нелинейности приводит к тому, что кинетическая и потенциальная энергии выравниваются быстрее, чем в гармоническом кристалле.

Исследуем влияние нелинейности на процесс перераспределения энергии по направлениям. Пусть начальные скорости частиц направлены вдоль оси x , параллельной одному из базисных векторов решетки. В ходе молекулярно-динамического моделирования вычислялась разность компонент тензора температуры T_{xx} , T_{yy} , соответствующих направлениям x и y . Зависимость $T_{xx} - T_{yy}$ от времени представлена на рис. 2.6. Кривые соответствуют среднему значению по 25 реализациям с различными случайными начальными скоростями. Видим, что при переходе к стационарному состоянию разность $T_{xx} - T_{yy}$ в течение одного периода τ_* уменьшается примерно в четыре раза, затем медленно стремится к нолю.

Таким образом, наличие нелинейности приводит к тому, что на процессы, происходящие в гармоническом кристалле, накладывается медленный эволюционный процесс. Скорость эволю-

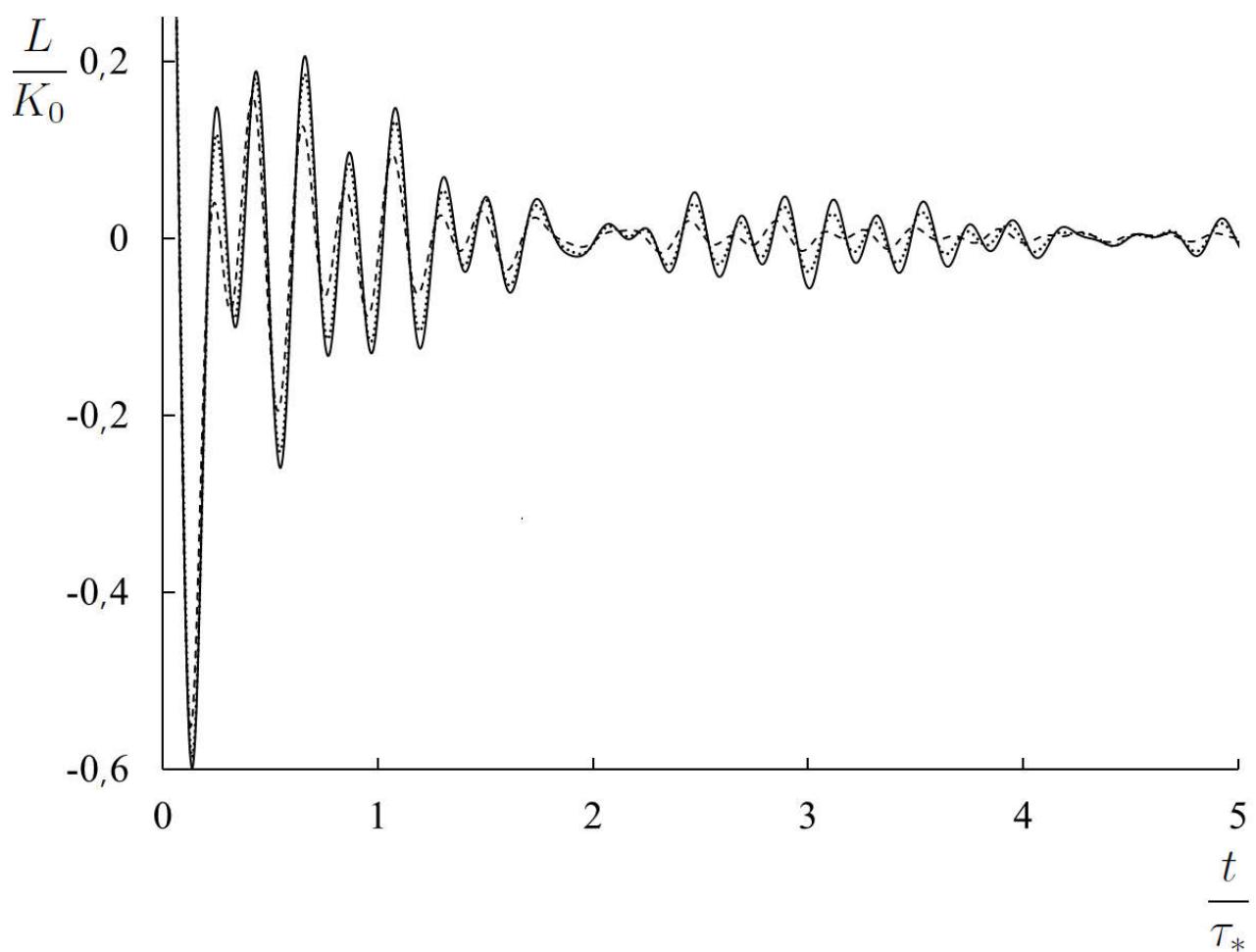


Рис. 2.5. Выравнивание кинетической и потенциальной энергий в треугольной решетке с взаимодействиями Леннарда—Джонса (частицы имеют случайные скорости, равномерно распределенные в круге радиуса v_0 : сплошная линия — $v_0/v_d = 0,05$; точка — $v_0/v_d = 0,25$; пунктирная линия — $v_0/v_d = 0,5$

ционного процесса зависит от степени нелинейности (температуры).

2.10. Выводы

Приведено аналитическое описание двух быстрых тепловых процессов, происходящих в однородно нагретых гармонических кристаллах: 1) выравнивание кинетической и потенциальной энергий, 2) перераспределение энергии по пространственным направ-

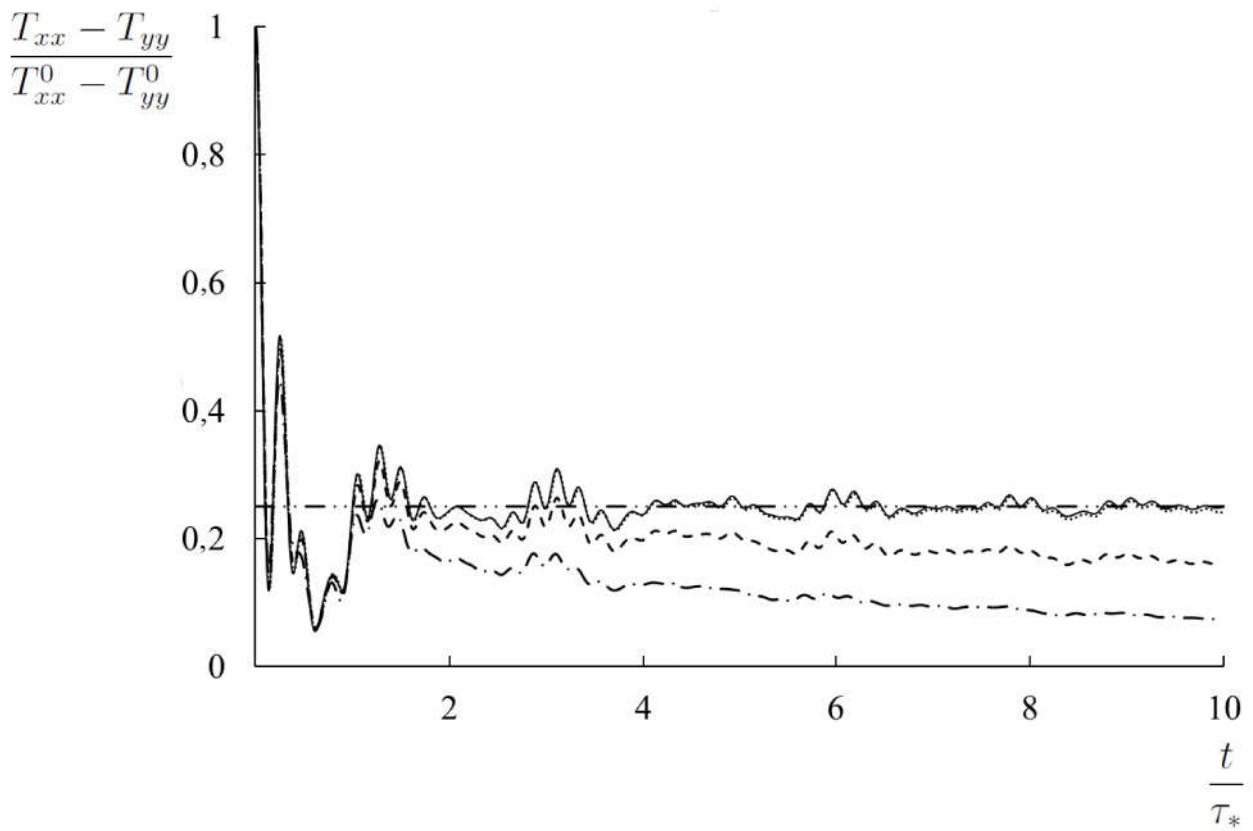


Рис. 2.6. Перераспределение энергии по пространственным направлениям в треугольной решетке с взаимодействиями Леннарда–Джонса (частицы имеют случайные скорости, равномерно распределенные в круге радиуса v_0 : точка — $v_0/v_d = 0,05$; пунктирная линия — $v_0/v_d = 0,25$; штрих-пунктирная линия — $v_0/v_d = 0,5$; штрих-пунктирная линия с двумя точками — аналитическое решение стационарной задачи для гармонического кристалла; сплошная линия — численное решение уравнений динамики решетки (2.2)

лениям. Получена замкнутая система уравнений с детерминированными начальными условиями, описывающая оба процесса в двухмерном и трехмерном случаях. Показано, что при переходе к стационарному состоянию кинетическая и потенциальная энергии выравниваются. Кинетическая энергия перераспределяется по пространственным направлениям, но теорема о равном распределении не выполняется. Иными словами, кинетическая температура проявляет тензорные свойства. Выведена система уравнений, позволяющая, в частности, определить связь тензора температуры в стационарном состоянии с начальными условия-

ми.

В качестве примера рассмотрены квадратная и треугольная решетки. В квадратной решетке перераспределение энергии по направлениям не происходит. Выравнивание кинетической и потенциальной энергий, соответствующих одному направлению, описывается функцией Бесселя. В треугольной решетке перераспределение энергии по направлениям происходит. Однако теорема о равном распределении не выполняется. Кроме того, ковариация скоростей пары частиц $\langle \mathbf{v}_i \mathbf{v}_j \rangle$ не равна нолю. Она убывает обратно пропорционально квадрату расстояния между частицами. Разница между кинетической и потенциальной энергиами совершают затухающие колебания с амплитудой, обратно пропорциональной времени. В квадратной решетке аналогичные колебания затухают обратно пропорционально корню из времени. Для треугольной решетки характерное время данных переходных процессов составляет порядка 10 периодов колебаний атомов.

Численно исследовано влияние нелинейности. Показано, что малая нелинейность приводит к тому, что на быстрые процессы накладывается медленный процесс, вызванный наличием нелинейности. Таким образом, полученные результаты можно применять в том числе и для описания быстрых переходных процессов в слабонелинейных системах.

Заключение

В пособии изложен оригинальный подход, позволяющий аналитически описывать тепловые процессы в гармонических кристаллах. Рассмотрены дискретные уравнения динамики кристалла при периодических граничных условиях. Стохастичность задачи заключена в начальных условиях. Подход позволяет свести стохастическую задачу для перемещений частиц к замкнутой детерминированной задаче для статистических характеристик пар частиц. В качестве таких характеристик могут выступать ковариации перемещений или скоростей частиц. С математической точки зрения задача сводится к линейным уравнениям, дифференциальным по времени и разностным по индексам частиц.

Показана возможность разделения тепловых процессов на быстрые и медленные. К быстрым процессам относятся выравнивание кинетической и потенциальной энергий и перераспределение энергии по пространственным направлениям, к медленным — распространение тепла. Быстрые процессы характеризуются частотами, соответствующими колебаниям индивидуальных атомов, медленные процессы — частотами, соответствующим коллективным колебаниям макроскопических групп атомов. Данные процессы описываются дифференциально-разностными уравнениями. В уравнении, описывающем медленные процессы, может быть проведена континуализация по пространственной координате, что приводит к существенному упрощению задачи. Для быстрых процессов получается уравнение, дифференциальное по времени и разностное по корреляционно-

му индексу. Такое уравнение не содержит дифференцирования по пространственной координате и поэтому описывает изолированные процессы в каждой точке пространства.

Изложенный подход применяется для описания одно-, двух- и трехмерных кристаллов. При обобщении на многомерный случай ковариации скоростей и перемещений частиц становятся тензорными величинами. В результате возникает необходимость рассмотрения тензорной температуры. Кроме того, появляется процесс перераспределения энергии по пространственным направлениям, отсутствующий в одномерном случае.

Представляется, что результаты, полученные для гармонических кристаллов, будут полезны и при описании тепловых процессов в слабонелинейных системах. Малая нелинейность приводит к тому, что выравнивание кинетической и потенциальной энергий происходит быстрее, чем в гармоническом кристалле. Кроме того, добавляется медленный процесс выравнивания кинетических энергий, соответствующих различным пространственным направлениям.

Библиографический список

1. *Lee C., Wei X., Kysar J.W., Hone J.* Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene // *Science*. – 2008. – Vol. 321. – P. 385–388.
2. Breakdown of fourier’s law in nanotube thermal conductors / C. W. Chang [et al.] // *Phys. Rev. Lett.* – 2008. – Vol. 101. – P. 075903.
3. Length-dependent thermal conductivity in suspended single-layer graphene. / X. Xu [et al.] // *Nature Communications*. – 2014. – Vol. – 5. P. 3689.
4. Micron-scale ballistic thermal conduction and suppressed thermal conductivity in heterogeneously interfaced nanowires / T. K. Hsiao [et al.] // *Phys. Rev. B*. – 2015. – Vol. 91. – P. 035406.
5. *Rieder Z., Lebowitz J. L., Lieb E.* Properties of a Harmonic Crystal in a Stationary Nonequilibrium State // *J. Math. Phys.* – 1967. – Vol. 8(5). – P. 1073–1078.
6. *Dhar A., Dandekar R.* Heat transport and current fluctuations in harmonic crystals // *Physica A*. – 2015. – Vol. 418. P. 49–64.
7. *Hoover W. G., Hoover C. G.* Simulation and control of chaotic nonequilibrium systems – World Scientific, 2015. – 324 p. – (Advanced Series in Nonlinear Dynamics: Vol. 27).
8. *Кривцов А. М.* Распространение тепла в бесконечном одномерном гармоническом кристалле / А. М. Кривцов. – ДАН. – 2015. – Вып. 464, № 2. – С. 162–166.

9. *Krivtsov A. M.* On unsteady heat conduction in a harmonic crystal. – 2015 // ArXiv:1509.02506.
10. *Hemmer P. C.* Dynamic and stochastic types of motion in linear chain. Thesis. – Trondheim, Norway, 1959. – 95 p.
11. *Shoby K., Yoshida T., Mori T.* Dynamic properties of one-dimensional harmonic liquids. Pt. II // Prog. Theor. Phys. – 1981. – Vol. 66. – P. 1160 – 1168.
12. *Rubin R. J., Greer W. L.* Abnormal lattice thermal conductivity of a one-dimensional, harmonic, isotopically disordered crystal // J. of Math. Phys. – 1971. – Vol. 12. – P. 1686 – 1701.
13. *Gendelman O. V., Savin A. V.* Nonstationary heat conduction in one-dimensional chains with conserved momentum // Phys. Rev. E. – 2010. – Vol. 81. – P. 020103.
14. *Kachman T.* Master-degree thesis under supervision of O. V. Gendelman. – Technion, Izrael, 2011. – 187 p.
15. *Manvi R., Duvall G. E., Lowell S. C.* Finite amplitude longitudinal waves in lattices // Int. J. Mech. Sci. – 1969. – Vol. 11. – P. 1.
16. *Holian B. L., Straub G. K.* Molecular dynamics of shock waves in one-dimensional chains // Phys. Rev. B. – 1978. – Vol. 18. – P. 1593.
17. *Bonetto F., Lebowitz J. L., Rey-Bellet L.* Fourier's law: a challenge to theorists // Mathematical Physics 2000 / ed. by A. Fokas et al.; Imperial College Press. – London, 2000. – P. 128–150.
18. *Lepri S., Livi R., Politi A.* Thermal conduction in classical low-dimensional lattices // Phys. Rep. – 2003. – Vol. 377. – P. 1 – 80.
19. *Dhar A.* Heat transport in low-dimensional systems // Advances in Phys. – 2008. – Vol. 57. – P. 457 – 537.
20. *Reid J. C., Evans D. J., Searles D. J.* Communication: Beyond Boltzmann's H-theorem: Demonstration of the relaxation theorem for a non-monotonic approach to equilibrium // J. Chem. Phys. – 2012. – Vol. 136. – P. 02110.

21. Petersen C. F., Evans D. J., Williams S. R. Dissipation in monotonic and non-monotonic relaxation to equilibrium // *J. Chem. Phys.* – 2016. – Vol. 144. – P. 074107.
22. Ударно-волновые явления в конденсированных средах / Г.И. Канель [и др.]. – М.: Янус-К, 1996. – 407 с.
23. Holian B. L., Hoover W. G., Moran B., Straub G. K. Shock-wave structure via nonequilibrium molecular dynamics and Navier-Stokes continuum mechanics // *Phys. Rev. A.* – 1980. – Vol. 22. – P. 2798.
24. Holian B. L., Mareschal M. Heat-flow equation motivated by the ideal-gas shock wave // *Phys. Rev. E.* – 2010. – Vol. 82. – P. 026707.
25. Hoover W. G., Hoover C. G., Travis K. P. // Shock-wave compression and Joule-Thomson expansion. *Phys. Rev. Lett.* – 2014. – Vol. 112. – P. 144504.
26. Silva F., Teichmann S. M., Cousin S. L., Hemmer M., Biegert J. // Spatiotemporal isolation of attosecond soft X-ray pulses in the water window. *Nat. Commun.* – 2015. – Vol. 6. – P. 6611.
27. Реализация предельных значений объемной и сдвиговой прочности железа при воздействии фемтосекундных лазерных импульсов / С.И. Ашитков [и др.] Письма в ЖЭТФ. – 2013. – Vol. 98. – P. 439.
28. Inogamov N. A., Petrov Yu. V., Zhakhovsky V. V., Khokhlov V. A., Demaske B. J., Ashitkov S. I., Khishchenko K. V., Migdal K. P., Agranat M. B., Anisimov S. I., Fortov V. E., Oleynik I. I. Two-temperature thermodynamic and kinetic properties of transition metals irradiated by femtosecond lasers // *AIP Conf. Proc.* – 2012. – Vol. 1464. – P. 593.
29. Poletkin K. V., Gurzadyan G. G., Shang J., Kulish V. Ultrafast heat transfer on nanoscale in thin gold films // *Appl. Phys. B.* – 2012. – Vol. 107. – P. 137–143.
30. Indeitsev D. A., Naumov V. N., Semenov B. N., Belyaev A. K. Thermoelastic waves in a continuum with complex structure // *ZAMM.* – 2009. – Vol. 89. – P. 279.
31. Кузькин В. А. Высокочастотные тепловые процессы в гармонических кристаллах / В. А. Кузькин, А. М. Кривцов // *ДАН.* – 2016. – Т. 472, №. 5. – 2017. – С. 529–533.

32. *Krivtsov A. M.* Dynamics of energy characteristics in one-dimensional crystal // Advanced Problems in Mechanics: Proc. of XXXIV Summer School, St. Petersburg, Russia. – Spb., 2006. – P. 274–208.
33. *Кривцов А. М.* Колебания энергий в одномерном кристалле / А.М. Кривцов // ДАН. – 2014. – Вып. 458, № 3. – С. 279–281.
34. *Бабенков М.Б.* Колебания энергий в одномерном гармоническом кристалле на упругом основании // М.Б. Бабенков, А.М. Кривцов, Д.В. Цветков / Физ. мезомех. – 2016. – № 19. – С. 60.
35. *Кривцов А. М.* Асимптотическое описание колебаний энергий одномерного кристалла на подложке: документ от 18–22 декабря 2015 г., 11–13 января 2016 г. / А.М. Кривцов. – Рукоп.
36. *Chandrasekharaiyah D. S.* Hyperbolic thermoelasticity: a review of recent literature // Appl. Mech. Rev. – 1986. – Vol. 39. – P. 355 – 376.
37. *Бабенков М. Б.* Распространение тепла в бесконечном одномерном гармоническом кристалле на упругом основании: документ от 1 декабря 2015 г. – 15 января 2016 г. / М.Б. Бабенков. – Рукоп.
38. *Tzou D.Y.* Macro- to microscale heat transfer: the lagging behavior. – John Wiley & Sons, 2015. – 566 р.
39. *Гольдштейн Р. В., Морозов Н. Ф.* // Механика деформирования и разрушения наноматериалов и нанотехнологии / Р.В. Гольдштейн, Н.Ф. Морозов Физ. мезомех. – 2007. – Т. 10, № 5. – С. 17–30.
40. *Кузькин В. А.* Аналитическое описание переходных тепловых процессов в гармонических кристаллах/ В.А. Кузькин, А.М. Кривцов. // ФТТ. – 2017. – Т. 59, вып. 5. – С. 1023–1035.
41. *Михайлин А. И.* Статистика флюктуаций кинетической энергии атомов в твердом теле (компьютерный эксперимент) / А.И. Михайлин, Л.В. Жигилей, А.И. Слуцкер // ФТТ. – 1995. – Вып. 37. – С. 1784.
42. *Слуцкер А. И.* Характеристики элементарных актов в кинетике разрушения металлов / А.И. Слуцкер // ФТТ. – 2004. – Вып. 46. – С. 1606.
43. *Ландау Л. Д.* Теоретическая физика. Статистическая физика / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – М.: Наука, 1976. – 584 с.

44. Hoover W. G. Computational statistical mechanics. – N. Y.: Elsevier, 1991. – 330 p.
45. Kuzkin V. A., Krivtsov A. M., Podolskaya E. A., Kachanov M. L. Lattice with vacancies: elastic fields and effective properties in frameworks of discrete and continuum models // Phil. Mag. – 2016. – Vol. 96, № 15. – P. 15–38.
46. Dean P. The vibrations of three two-dimensional lattices // Proc. Camb. Phil. Soc. – 1963. – Vol. 59. – P. 383.
47. Кривцов А. М. Получение уравнений состояния идеальных кристаллов простой структуры / А. М. Кривцов, В. А. Кузькин // МТТ. – 2011. – Т. 3. – С. 67–82.
48. Панченко А. Ю. Анализ уравнения состояния и определение функции Грюнайзена двумерных кристаллических решеток / А. Ю. Панченко, Е. А. Подольская, А. М. Кривцов // ДАН. – 2017. – Т. 473, вып. 2. – С. 159–162.

Приложения

Приложение 1

Дифференцирование ковариаций

1.1. Определения ковариаций

Основные ковариации — перемещений, скоростей и смешанные:

$$\xi_{pq} \stackrel{\text{def}}{=} \langle u_p u_q \rangle; \quad \kappa_{pq} \stackrel{\text{def}}{=} \langle v_p v_q \rangle; \quad \nu_{pq} \stackrel{\text{def}}{=} \langle u_p v_q \rangle.$$

Симметричная и антисимметричная часть смешанных ковариаций:

$$\eta_{pq} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2}(\nu_{pq} + \nu_{qp}); \quad \mu_{pq} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2}(\nu_{pq} - \nu_{qp}).$$

Обобщенная потенциальная энергия

$$\pi_{pq} = -\frac{1}{2}(\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q)\xi_{pq}.$$

Обобщенные гамильтониан и лагранжиан:

$$\epsilon_{pq} \stackrel{\text{def}}{=} \kappa_{pq} + \pi_{pq}; \quad \lambda_{pq} \stackrel{\text{def}}{=} \kappa_{pq} - \pi_{pq}.$$

Все ковариации, кроме ν_{qp} , симметричны относительно перестановки индексов.

1.2. Первые производные по времени

Ковариация перемещений, нелокальные потенциальная, кинетическая и полная энергии:

$$\begin{aligned} \dot{\xi}_{pq} &= \nu_{pq} + \nu_{qp} = 2\eta_{pq}; & \dot{\pi}_{pq} &= -(\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q)\eta_{pq}; \\ \dot{\kappa}_{pq} &= \mathcal{L}_p\nu_{pq} + \mathcal{L}_q\nu_{qp}; & \dot{\epsilon}_{pq} &= (\mathcal{L}_p - \mathcal{L}_q)\mu_{pq}. \end{aligned} \tag{П.1.1}$$

Обобщенный лагранжиан

$$\dot{\lambda}_{pq} = \frac{1}{2}(3\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q)\nu_{pq} + \frac{1}{2}(\mathcal{L}_p + 3\mathcal{L}_q)\nu_{qp}.$$

Альтернативная формула для обобщенного лагранжиана

$$\dot{\lambda}_{pq} = 2(\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q)\eta_{pq} + (\mathcal{L}_p - \mathcal{L}_q)\mu_{pq}.$$

Смешанные ковариации

$$\dot{\nu}_{pq} = \kappa_{pq} + \mathcal{L}_q \xi_{pq}.$$

Симметричная и антисимметричная формы смешанных ковариаций:

$$\dot{\eta}_{pq} = \lambda_{pq}, \quad \dot{\mu}_{pq} = \frac{1}{2}(\mathcal{L}_q - \mathcal{L}_p)\xi_{pq}.$$

1.3. Вторые производные по времени

Ковариация перемещений и скоростей:

$$\ddot{\xi}_{pq} = 2\lambda_{pq}; \quad \ddot{\kappa}_{pq} = (\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q)\kappa_{pq} + 2\mathcal{L}_p \mathcal{L}_q \xi_{pq}.$$

Нелокальные потенциальная и полная энергии:

$$\ddot{\pi}_{pq} = -(\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q)\lambda_{pq};, \quad \ddot{\epsilon}_{pq} = -\frac{1}{2}(\mathcal{L}_p - \mathcal{L}_q)^2 \xi_{pq}.$$

Нелокальный лагранжиан

$$\ddot{\lambda}_{pq} = 2(\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q)\lambda_{pq} - \frac{1}{2}(\mathcal{L}_p - \mathcal{L}_q)^2 \xi_{pq}.$$

Альтернативная формула для ковариации скоростей

$$\ddot{\kappa}_{pq} = (\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q)\lambda_{pq} - \frac{1}{2}(\mathcal{L}_p - \mathcal{L}_q)^2 \xi_{pq}.$$

Смешанные ковариации

$$\ddot{\nu}_{pq} = (\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q)\nu_{pq} + 2\mathcal{L}_q \nu_{qp}.$$

Симметричная и антисимметричная формы смешанных ковариаций:

$$\ddot{\eta}_{pq} = 2(\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q)\eta_{pq} + (\mathcal{L}_p - \mathcal{L}_q)\mu_{pq}, \quad \ddot{\mu}_{pq} = (\mathcal{L}_q - \mathcal{L}_p)\eta_{pq}. \quad (\Pi.1.2)$$

Запись системы (2) может быть сокращена:

$$\ddot{\eta} = 4\mathcal{L}\eta - 2\mathcal{M}\mu; , \quad \ddot{\mu} = 2\mathcal{M}\eta,$$

где переменные η и μ — симметричная и несимметричная части ν_{pq} ; операторы \mathcal{L} и \mathcal{M} — полусумма и полуразность \mathcal{L}_q и \mathcal{L}_p , индексы опущены.

1.4. Трети производные по времени

Ковариации перемещений и скоростей:

$$\begin{aligned}\ddot{\xi}_{pq} &= (3\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q)\nu_{pq} + (\mathcal{L}_p + 3\mathcal{L}_q)\nu_{qp}; \\ \ddot{\kappa}_{pq} &= \mathcal{L}_p(\mathcal{L}_p + 3\mathcal{L}_q)\nu_{pq} + \mathcal{L}_q(3\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q)\nu_{qp}.\end{aligned}$$

1.5. Представление через ковариации перемещений

$$\begin{aligned}\kappa_{pq} &= \frac{1}{2}\ddot{\xi}_{pq} - \frac{1}{2}(\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q)\xi_{pq}; \quad \pi_{pq} = -\frac{1}{2}(\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q)\xi_{pq}; \\ \epsilon_{pq} &= \frac{1}{2}\ddot{\xi}_{pq} - (\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q)\xi_{pq}; \quad \lambda_{pq} = \frac{1}{2}\ddot{\xi}_{pq}; \\ \dot{\nu}_{pq} &= \frac{1}{2}\ddot{\xi}_{pq} + \frac{1}{2}(\mathcal{L}_q - \mathcal{L}_p)\xi_{pq}.\end{aligned}$$

1.6. Динамика обобщенных энергий.

Из уравнений (1.13) можно получить замкнутую систему уравнений динамики обобщенных кинетической и потенциальной энергий:

$$\begin{aligned}(\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q)\ddot{\kappa}_{pq} &= (\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q)^2\kappa_{pq} - 4\mathcal{L}_p\mathcal{L}_q\pi_{pq}; \\ (\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q)\ddot{\pi}_{pq} &= (\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q)^2(\pi_{pq} - \kappa_{pq}).\end{aligned}\tag{П.1.3}$$

Более простая форма второго уравнения (П.1.3)

$$\ddot{\pi}_{pq} = (\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q)(\pi_{pq} - \kappa_{pq}).$$

Замкнутая система уравнений динамики обобщенных гамильтониана и лагранжиана:

$$\begin{aligned}2(\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q)\ddot{\epsilon}_{pq} &= (\mathcal{L}_p - \mathcal{L}_q)^2(\epsilon_{pq} - \lambda_{pq}); \\ 2(\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q)\ddot{\lambda}_{pq} &= (\mathcal{L}_p - \mathcal{L}_q)^2\epsilon_{pq} + (3\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q)(\mathcal{L}_p + 3\mathcal{L}_q)\lambda_{pq}.\end{aligned}$$

Наиболее простые уравнения (незамкнутая система)

$$(\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q)\ddot{\epsilon}_{pq} = (\mathcal{L}_p - \mathcal{L}_q)^2\pi_{pq}; \quad \ddot{\pi}_{pq} = (\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q)\lambda_{pq}.$$

Замкнутые уравнения для получения приближенных решений

$$\begin{aligned} (\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q) \ddot{\epsilon}_{pq} - \frac{1}{2}(\mathcal{L}_p - \mathcal{L}_q)^2 \epsilon_{pq} &= -\frac{1}{2}(\mathcal{L}_p - \mathcal{L}_q)^2 \lambda_{pq}; \\ (\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q) \ddot{\lambda}_{pq} - 2(\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q)^2 \lambda_{pq} &= \frac{1}{2}(\mathcal{L}_p - \mathcal{L}_q)^2 (\epsilon_{pq} - \lambda_{pq}). \end{aligned} \quad (\text{П.1.4})$$

Более простая форма второго уравнения (П.1.4) (незамкнутая)

$$\ddot{\lambda}_{pq} - 2(\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q) \lambda_{pq} = -\frac{1}{2}(\mathcal{L}_p - \mathcal{L}_q)^2 \xi_{pq}.$$

Приложение 2

Переход от позиционного к пространственно-корреляционному описанию

2.1. Пространственно-однородное состояние

Покажем, что в пространственно-однородном состоянии позиционные операторы \mathcal{L}_p и \mathcal{L}_q (1.2), (1.12) неразличимы и равны \mathcal{L}_n , где $n \stackrel{\text{def}}{=} q - p$.

Представим оператор \mathcal{L} из (1.2) в виде

$$\mathcal{L} = \omega_0^2 \Delta^2 - \omega_1^2; \quad \Delta^2 \stackrel{\text{def}}{=} h + h^{-1} - 2, \quad (\text{П.2.5})$$

где ω_0 и ω_1 — характерные частоты; h — оператор сдвига индекса,

$$hu_i \stackrel{\text{def}}{=} u_{i+1}; \quad h^{-1}u_i = u_{i-1}.$$

Связь позиционных p, q и пространственно-корреляционных k, n индексов имеет вид (1.51):

$$k \stackrel{\text{def}}{=} p + q; \quad n \stackrel{\text{def}}{=} q - p.$$

Тогда для произвольной величины ξ , зависящей от индексов p, q или k, n , выполняются соотношения

$$\begin{aligned} h_p \xi_{p,q} &= \xi_{p+1,q}, & h_q \xi_{p,q} &= \xi_{p,q+1}; \\ h_p \xi_{k,n} &= \xi_{k+1,n-1}, & h_q \xi_{k,n} &= \xi_{k+1,n+1}. \end{aligned} \quad (\text{П.2.6})$$

Выражения (П.2.6) могут быть записаны в виде связи операторов сдвига:

$$h_p = h_k h_n^{-1}; \quad h_q = h_k h_n. \quad (\text{П.2.7})$$

Тогда для вторых разностей Δ^2 получаем

$$\Delta_p^2 = h_k h_n^{-1} + h_k^{-1} h_n - 2; \quad \Delta_q^2 = h_k h_n + h_k^{-1} h_n^{-1} - 2. \quad (\text{П.2.8})$$

В пространственно-однородном состоянии величины не зависят от пространственного индекса k , следовательно, можно положить $h_k = 1$ и формулы (П.2.8) принимают вид

$$\Delta_p^2 = h_n^{-1} + h_n - 2; \quad \Delta_q^2 = h_n + h_n^{-1} - 2 \quad \Rightarrow \quad \Delta_p^2 = \Delta_q^2 = \Delta_n^2.$$

Но тогда из (П.2.5) получаем соотношение для операторов \mathcal{L} :

$$\mathcal{L}_p = \mathcal{L}_q = \mathcal{L}_n, \quad (\text{П.2.9})$$

что и требовалось доказать.

Аналогично может быть доказано, что равенство (П.2.9) будет выполняться для оператора \mathcal{L} более общего вида:

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}(h, h^{-1}) \equiv \mathcal{L}(h^{-1}, h). \quad (\text{П.2.10})$$

Так как в пространственно-однородном состоянии, согласно (П.2.7),

$$h_p = h_n^{-1}; \quad h_q = h_n, \quad (\text{П.2.11})$$

то ключевым моментом для доказательства равенства (П.2.9) является независимость оператора \mathcal{L} от замены h на h^{-1} в (П.2.10). Это свойство справедливо при условии симметрии одномерного кристалла относительно замены направления вдоль кристалла на противоположное (зеркальная симметрия относительно плоскости, перпендикулярной кристаллу). В частности, равенство (П.2.9) будет выполняться в случае добавления взаимодействия с дальнейшими соседями (вплоть до всех частиц в кристалле) при условии сохранения зеркальной симметрии.

2.2. Факторизация разности $\mathcal{L}_q - \mathcal{L}_p$

Для гармонического кристалла на упругой подложке (1.2) выполняется соотношение

$$\mathcal{L}_q - \mathcal{L}_p = \omega_0^2 \mathcal{D}_n \mathcal{D}_k,$$

где

$$k \stackrel{\text{def}}{=} p + q; \quad n \stackrel{\text{def}}{=} q - p; \quad \mathcal{D}u_i \stackrel{\text{def}}{=} u_{i+1} - u_{i-1}.$$

Доказательство 1. Из (1.2) следует

$$\mathcal{L}_q - \mathcal{L}_p = \omega_0^2 (\Delta_q^2 - \Delta_p^2).$$

Непосредственное вычисление дает

$$(\Delta_q^2 - \Delta_p^2) \xi_{n,k} = \xi_{n+1,k+1} - \xi_{n-1,k+1} + \xi_{n-1,k-1} - \xi_{n+1,k-1} = \mathcal{D}_n \mathcal{D}_k \xi_{n,k},$$

что и требовалось доказать.

Доказательство 2. Согласно (П.2.8),

$$\Delta_q^2 - \Delta_p^2 = h_k h_n + h_k^{-1} h_n^{-1} - h_k h_n^{-1} - h_k^{-1} h_n \equiv (h_k - h_k^{-1})(h_n - h_n^{-1}) = \mathcal{D}_k \mathcal{D}_n.$$

2.3. Континализация

Ковариации могут быть записаны в виде

$$\xi_{pq} = \xi_n(x),$$

где n — корреляционный индекс, $n \stackrel{\text{def}}{=} q - p$; x — пространственная координата,

$$x \stackrel{\text{def}}{=} \frac{ak}{2} = a \frac{p+q}{2}.$$

Зависимость ковариаций от x будем считать достаточно гладкой, чтобы они допускали разложение в ряд Тейлора. Запишем вторые разности ковариаций:

$$\Delta_p^2 \xi_{pq} = \xi_{n-1} \left(x + \frac{a}{2} \right) - 2\xi_n(x) + \xi_{n+1} \left(x - \frac{a}{2} \right);$$

$$\Delta_q^2 \xi_{pq} = \xi_{n+1} \left(x + \frac{a}{2} \right) - 2\xi_n(x) + \xi_{n-1} \left(x - \frac{a}{2} \right).$$

Раскладывая в ряд по x до слагаемых 2-го порядка малости, получаем

$$\begin{aligned} \Delta_p^2 \xi_{pq} &= \Delta^2 \xi_n + \frac{a}{2} (\xi_{n-1} - \xi_{n+1})' + \frac{a^2}{8} (\xi_{n-1} + \xi_{n+1})''; \\ \Delta_q^2 \xi_{pq} &= \Delta^2 \xi_n + \frac{a}{2} (\xi_{n+1} - \xi_{n-1})' + \frac{a^2}{8} (\xi_{n+1} + \xi_{n-1})'', \end{aligned} \tag{П.2.12}$$

где $\Delta^2 \xi_n = \xi_{n+1} - 2\xi_n + \xi_{n-1}$; штрихом обозначена производная по x . Альтернативно можно воспользоваться представлениями (П.2.8) и квадратичной аппроксимацией

$$h_k^{\pm 1} = 1 \pm \frac{a}{2} \partial_x + \frac{a^2}{8} \partial_x^2,$$

что приводит к соотношениям

$$\Delta_{q,p}^2 = \Delta^2 \pm \frac{a}{2}(h - h^{-1})\partial_x + \frac{a^2}{8}(h + h^{-1})\partial_x^2, \quad (\text{П.2.13})$$

эквивалентным (П.2.12). Складывая и вычитая соотношения (П.2.13), получаем

$$\Delta_p^2 + \Delta_q^2 = 2\Delta^2 + \frac{a^2}{4}(\Delta^2 + 2)\partial_x^2; \quad \Delta_q^2 - \Delta_p^2 = a\mathcal{D}\partial_x, \quad (\text{П.2.14})$$

где использованы соотношения

$$\Delta^2 + 2 = h + h^{-1};, \quad \mathcal{D} = h - h^{-1}. \quad (\text{П.2.15})$$

Первое соотношение (П.2.15) является очевидным тождеством, второе — обозначением.

Используя разложения (П.2.14), для цепочки на упругом основании (1.2) имеем

$$\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q = 2(\omega_0^2 \Delta^2 - \omega_1^2) + \frac{1}{4}c^2(\Delta^2 + 2)\partial_x^2; \quad \mathcal{L}_q - \mathcal{L}_p = \omega_0 c \mathcal{D} \partial_x,$$

где $c \stackrel{\text{def}}{=} \omega_0 a$ — скорость звука. В первом приближении

$$\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q = 2\mathcal{L}; \quad \mathcal{L}_q - \mathcal{L}_p = a\mathcal{R}\partial_x,$$

где для операторов \mathcal{L} и \mathcal{R} справедливы представления

$$\mathcal{L} = \omega_0^2 \Delta^2 - \omega_1^2; \quad \mathcal{R} = \omega_0^2 \mathcal{D}$$

или

$$\mathcal{L}\xi_n = \omega_0^2(\xi_{n+1} - 2\xi_n + \xi_{n-1}) - \omega_1^2; , \quad \mathcal{R}\xi_n = \omega_0^2(\xi_{n+1} - \xi_{n-1}).$$

Таким образом, \mathcal{L} — это исходный оператор, входящий в уравнение движения частицы (1.1), оператор \mathcal{R} определен ранее соотношением (1.53).

Приложение 3

Дополнительные разделы дискретного описания динамики кристалла

3.1. Стационарное состояние

В разделе 1.5 рассмотрен стационарный режим при пространственно-однородном состоянии системы. Запишем формулы без использования предположения об однородности. При этом ограничимся строго стационарным состоянием, при котором все ковариационные переменные постоянны. Обращение в ноль производных в уравнениях баланса (1.12)–(1.14) приводит, соответственно, к разностным уравнениям:

$$\begin{aligned} \nu_{pq} + \nu_{qp} &= 0; & \mathcal{L}_p \nu_{pq} + \mathcal{L}_q \nu_{qp} &= 0; & \kappa_{pq} + \mathcal{L}_q \xi_{pq} &= 0; \\ (\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q) \xi_{pq} + 2\kappa_{pq} &= 0; & (\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q) \kappa_{pq} + 2\mathcal{L}_p \mathcal{L}_q \xi_{pq} &= 0; & & (\text{П.3.16}) \\ (\mathcal{L}_p - \mathcal{L}_q)^2 \xi_{pq} &= 0. \end{aligned}$$

Уравнения (П.3.16) можно переписать в виде

$$\xi_{pq} = \xi_{qp}; \quad \kappa_{pq} = \kappa_{qp}; \quad \nu_{pq} = -\nu_{qp}; \quad (\text{П.3.17})$$

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_p \xi_{pq} &= \mathcal{L}_q \xi_{pq}; & \mathcal{L}_p \kappa_{pq} &= \mathcal{L}_q \kappa_{pq}; & \mathcal{L}_p \nu_{pq} &= \mathcal{L}_q \nu_{pq}; \\ (\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q) \xi_{pq} + 2\kappa_{pq} &= 0; & (\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q) \kappa_{pq} + 2\mathcal{L}_p \mathcal{L}_q \xi_{pq} &= 0; & & (\text{П.3.18}) \end{aligned}$$

Первые два уравнения (П.3.17) следуют из определения соответствующих величин и добавлены для полноты картины. Из (П.3.18) следует, что $\mathcal{L}_p = \mathcal{L}_q \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{L}$. Тогда первая формула (П.3.18) принимает вид

$$\mathcal{L} \xi_{pq} + \kappa_{pq} = 0, \quad (\text{П.3.19})$$

а вторая оказывается ее следствием. Как будет показано далее, соотношение (П.3.19), по сути, является обобщением теоремы о вириале для ковариационных величин.

Таким образом, в строго стационарном состоянии:

- величина ν_{pq} , в отличие от ξ_{pq} и κ_{pq} , меняет знак при перестановке индексов;
- операторы \mathcal{L}_p и \mathcal{L}_q неразличимы;

- выполняется вириальное соотношение (П.3.19).

Неразличимость операторов \mathcal{L}_p и \mathcal{L}_q свидетельствует о том, что из строгой стационарности состояния следует его пространственная однородность.

3.2. Альтернативные обобщенные энергии

Рассмотрим уравнения динамики ковариаций (1.13):

$$\ddot{\xi}_{pq} = 2\kappa_{pq} + (\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q)\xi_{pq}; \quad \dot{\kappa}_{pq} = (\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q)\kappa_{pq} + 2\mathcal{L}_p\mathcal{L}_q\xi_{pq}. \quad (\text{П.3.20})$$

В стационарном состоянии левые части равенств (П.3.20) обращаются в ноль, а правые части дают баланс кинетических и потенциальных слагаемых, выполняющийся в стационарном состоянии. Это приводит к мысли о введении величин

$$\epsilon_{pq} = \kappa_{pq} - \frac{1}{2}(\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q)\xi_{pq}; \quad \tilde{\epsilon}_{pq} = \frac{1}{2}(\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q)\kappa_{pq} - \mathcal{L}_p\mathcal{L}_q\xi_{pq}, \quad (\text{П.3.21})$$

аналогичных полной механической энергии. Наряду с введенным ранее обозначением $\pi_{pq} \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{1}{2}(\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q)\xi_{pq}$, примем обозначения для альтернативных кинетической и потенциальной энергий:

$$\tilde{\kappa}_{pq} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2}(\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q)\kappa_{pq}; \quad \tilde{\pi}_{pq} \stackrel{\text{def}}{=} -\mathcal{L}_p\mathcal{L}_q\xi_{pq}.$$

Тогда уравнения (П.3.20)–(П.3.21) могут быть записаны в виде

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}\ddot{\xi}_{pq} &= \kappa_{pq} - \pi_{pq}; & \frac{1}{2}\ddot{\kappa}_{pq} &= \tilde{\kappa}_{pq} - \tilde{\pi}_{pq}; \\ \epsilon_{pq} &= \kappa_{pq} + \pi_{pq}; & \tilde{\epsilon}_{pq} &= \tilde{\kappa}_{pq} + \tilde{\pi}_{pq}. \end{aligned}$$

Аналогично введенным ранее гамильтониану и лагранжиану имеем альтернативные гамильтониан и лагранжиан:

$$\tilde{\epsilon}_{pq} \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{\kappa}_{pq} + \tilde{\pi}_{pq}; \quad \tilde{\lambda}_{pq} \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{\kappa}_{pq} - \tilde{\pi}_{pq}.$$

Сравним уравнения, которым удовлетворяют основные (введенные ранее) и альтернативные величины:

$$\begin{aligned} \dot{\epsilon}_{pq} &= \frac{1}{2}(\mathcal{L}_p - \mathcal{L}_q)(\nu_{pq} - \nu_{qp}); & \lambda_{pq} &= \frac{1}{2}\ddot{\xi}_{pq}; \\ \dot{\tilde{\epsilon}}_{pq} &= \frac{1}{2}(\mathcal{L}_p - \mathcal{L}_q)(\mathcal{L}_p\nu_{pq} - \mathcal{L}_q\nu_{qp}); & \tilde{\lambda}_{pq} &= \frac{1}{2}\ddot{\kappa}_{pq}. \end{aligned} \quad (\text{П.3.22})$$

Первая колонка (П.3.22) дает уравнения баланса для гамильтонианов. Из них следует, что в пространственно-однородном состоянии и тот и другой гамильтонианы сохраняются. Следовательно, они в равной степени могут претендовать на роль полной обобщенной энергии. Альтернативный гамильтониан, правда, имеет размерность, отличную от размерности энергии. Однако это может быть решено введением соответствующего множителя. Лагранжианы, согласно (П.3.22), имеют простую дифференциальную связь с ковариациями перемещений и скоростей. Для альтернативных гамильтониана и лагранжиана могут быть также получены уравнения, аналогичные (1.58), из которых следуют приближенные уравнения динамики для быстрых (лагранжиан) и медленных (гамильтониан) движений.

Отметим, что, согласно (П.3.21), между основным и альтернативным гамильтонианами существует связь

$$\tilde{\epsilon}_{pq} = \frac{1}{2}(\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q)\epsilon_{pq} + \frac{1}{4}(\mathcal{L}_p - \mathcal{L}_q)^2\xi_{pq}. \quad (\text{П.3.23})$$

Из формулы (П.3.23) следует, что сохранение альтернативного гамильтониана в однородном состоянии есть следствие сохранения основного гамильтониана.

Для $p = q$ основные и альтернативные величины связаны через оператор $\mathcal{L} = \mathcal{L}_p = \mathcal{L}_q$:

$$\begin{aligned} \tilde{\kappa}_{pp} &= \mathcal{L}\kappa_{pp}, & \tilde{\pi}_{pp} &= \mathcal{L}\pi_{pp}, \\ \tilde{\epsilon}_{pp} &= \mathcal{L}\epsilon_{pp}, & \tilde{\lambda}_{pp} &= \mathcal{L}\lambda_{pp}. \end{aligned} \quad (\text{П.3.24})$$

Аналогичная связь выполняется и в пространственно-однородном состоянии.

Приложение 4

Колебания треугольной решетки

Рассмотрим треугольную решетку, состоящую из частиц массы m , соединенных пружинками жесткости $4C$. Будем использовать периодические граничные условия. Ячейка периодичности имеет форму ромба со стороной, состоящей из $2N + 1$ частиц. Радиус-векторы частиц задаются формулой (2.33). Уравнения движения имеют вид

$$\ddot{\mathbf{u}}_{k,n} = 4\mathcal{L} \cdot \mathbf{u}_{k,n}.$$

В начальный момент времени центральная частица ($k = 0, n = 0$) смешена вдоль связи \mathbf{e}_1 на u_0 . Начальные скорости и перемещения остальных частиц равны нулю.

Введем новые переменные:

$$\begin{aligned}\mathbf{u}_{k,n} &= w_1 \mathbf{e}_1 + w_2 \mathbf{e}_2; \quad w_1 = \frac{2}{3}(2u_1 + u_2); \\ w_2 &= \frac{2}{3}(2u_2 + u_1); \quad u_i = \mathbf{u}_{k,n} \cdot \mathbf{e}_i.\end{aligned}\tag{П.4.25}$$

Здесь и далее индексы k, n у величин w_1, w_2, u_1, u_2 для краткости опущены. С учетом (П.4.25) уравнения движения принимают вид

$$\begin{aligned}\ddot{w}_1 &= 2\omega_*^2(\Delta_1^2(2w_1 - w_2) + \Delta_3^2(w_1 + w_2)); \\ \ddot{w}_2 &= 2\omega_*^2(\Delta_2^2(2w_2 - w_1) + \Delta_3^2(w_1 + w_2)).\end{aligned}\tag{П.4.26}$$

Начальные условия

$$\mathbf{u}_{k,n} = u_0 \delta_k \delta_n \mathbf{e}_1; \quad w_1 = u_0 \delta_k \delta_n; \quad w_2 = 0; \quad \dot{w}_1 = \dot{w}_2 = 0.\tag{П.4.27}$$

Применим дискретное преобразование Фурье по индексам k, n к уравнениям (П.4.26). Для этого воспользуемся тождествами

$$\begin{aligned}\mathcal{F}(\Delta_1^2 g_{k,n}) &= -4 \sin^2 \theta_s \hat{g}_{s,p}; \quad \mathcal{F}(\Delta_2^2 g_{k,n}) = -4 \sin^2 \theta_p \hat{g}_{s,p}; \\ \mathcal{F}(\Delta_3^2 g_{k,n}) &= -4 \sin^2(\theta_s + \theta_p) \hat{g}_{s,p}; \quad \theta_s = \frac{\pi s}{2N + 1}.\end{aligned}\tag{П.4.28}$$

В результате для фурье-образов $\hat{w}_i = \mathcal{F}(w_i)$ имеем

$$\begin{aligned}\ddot{\hat{w}}_1 &= -8\omega_*^2 [(2 \sin^2 \theta_s + \sin^2(\theta_s + \theta_p)) \hat{w}_1 + (\sin^2(\theta_s + \theta_p) - \\ &- \sin^2 \theta_s) \hat{w}_2]; \\ \ddot{\hat{w}}_2 &= -8\omega_*^2 [(\sin^2(\theta_s + \theta_p) - \sin^2 \theta_p) \hat{w}_1 + (2 \sin^2 \theta_p + \sin^2(\theta_s + \\ &+ \theta_p)) \hat{w}_2].\end{aligned}\tag{П.4.29}$$

Собственные частоты Ω_1, Ω_2 , соответствующие системе (П.4.29), определяются уравнением

$$\begin{aligned}\Omega_j^4 - 16\omega_*^2 \Omega_j^2 (\sin^2 \theta_s + \sin^2 \theta_p + \sin^2(\theta_s + \theta_p)) + \\ + 192\omega_*^4 (\sin^2(\theta_s + \theta_p) \sin^2 \theta_s + \\ + \sin^2(\theta_s + \theta_p) \sin^2 \theta_p + \sin^2 \theta_s \sin^2 \theta_p) = 0, \quad j = 1, 2.\end{aligned}\tag{П.4.30}$$

Для \hat{w}_1, \hat{w}_2 начальные условия

$$\hat{w}_1 = u_0; \quad \hat{w}_2 = 0; \quad \dot{\hat{w}}_1 = \dot{\hat{w}}_2 = 0. \quad (\text{П.4.31})$$

Решая систему (П.4.29) с начальными условиями (П.4.31) и применяя обратное преобразование Фурье, получим

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_{k,n} &= w_1 \mathbf{e}_1 + w_2 \mathbf{e}_2; \\ w_1 &= \frac{u_0}{2(2N+1)^2} \sum_{s,p=-N}^N \cos(2\theta_s k + 2\theta_p n) \left(\cos(\Omega_1 t) + \cos(\Omega_2 t) + \right. \\ &\quad \left. + 16\omega_*^2 \frac{\sin^2 \theta_s - \sin^2 \theta_p}{\Omega_1^2 - \Omega_2^2} (\cos(\Omega_1 t) - \cos(\Omega_2 t)) \right); \\ w_2 &= \frac{8u_0}{(2N+1)^2} \sum_{s,p=-N}^N \frac{\omega_*^2 (\sin^2(\theta_s + \theta_p) - \sin^2 \theta_p)}{\Omega_1^2 - \Omega_2^2} \left(\cos(\Omega_1 t) - \right. \\ &\quad \left. \cos(\Omega_2 t) \right) \cos(2\theta_s k + 2\theta_p n). \end{aligned} \quad (\text{П.4.32})$$

Формулы (П.4.32) дают точное решение задачи о колебаниях треугольной решетки, в которой одна из частиц имеет начальное смещение.

*Кривцов Антон Мирославович
Кузькин Виталий Андреевич*

**МЕХАНИКА ДИСКРЕТНЫХ СРЕД
ПЕРЕХОДНЫЕ ТЕПЛОВЫЕ ПРОЦЕССЫ
В ГАРМОНИЧЕСКИХ КРИСТАЛАХ**

Учебное пособие

Редактор *O. B. Махрова*

Оригинал-макет подготовлен авторами

Свод. темпплан 2016 г.

Налоговая льгота — Общероссийский классификатор продукции
ОК 005-93, т. 2; 95 3005 — учебная литература

Подписано в печать. .2017. Формат 60x84/16.
Усл. печ. л. 6.0. Тираж 100. Заказ 164.

Отпечатано с оригинал-макета
в Издательско-полиграфическом центре Политехнического университета.
195251, Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29.
Тел.: (812) 552-77-17; 550-40-14