

УДК 539.3 : 539.4

Колебания энергий в одномерном гармоническом кристалле на упругом основании

М.Б. Бабенков^{1,2}, А.М. Кривцов^{1,2}, Д.В. Цветков^{1,2}¹ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, 195251, Россия² Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, 199178, Россия

Одномерный гармонический кристалл на упругом основании рассматривается как стохастическая система, случайность в которую вводится через начальные условия. Использование ковариаций скоростей и перемещений частиц позволяет свести стохастическую задачу к замкнутой детерминированной задаче для статистических характеристик пар частиц. В работе выведено и решено уравнение быстрых движений, описывающих колебания потенциальной и кинетической составляющих энергии системы. Построенные решения позволяют определить характер и оценить время затухания переходного процесса, приводящего систему в термодинамически равновесное состояние.

Ключевые слова: одномерный кристалл, теплопроводность, ковариации, колебания энергии, упругое основание

Energy oscillations in a one-dimensional harmonic crystal on an elastic substrate

M.B. Babenkov^{1,2}, A.M. Krivtsov^{1,2}, and D.V. Tsvetkov^{1,2}¹ Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, 195251, Russia² Institute of Problems of Mechanical Engineering RAS, St. Petersburg, 199178, Russia

One-dimensional harmonic crystal on an elastic substrate is considered as a stochastic system into which randomness is introduced through boundary conditions. The use of the particle velocity and displacement covariances reduces the stochastic problem to a closed deterministic problem for statistical characteristics of particle pairs. An equation of rapid motion that describes oscillations of potential and kinetic energy components of the system has been derived and solved. The obtained solutions are used to determine the character and to estimate the time of decay of the transient process that brings the system to thermodynamic equilibrium.

Ключевые слова: one-dimensional crystal, thermal conductivity, covariances, energy oscillations, elastic substrate

1. Введение

Механика материалов на нанометровом масштабном уровне имеет существенные особенности [1, 2], в значительной степени связанные с дискретностью атомарного строения вещества [3, 4]. Дискретность существенно влияет на волновые процессы в среде, внося дисперсию в закон распространения механических волн [5]. Классическим примером подобных систем является цепочка масс на упругом основании, описываемая в рамках гармонического (линейного) взаимодействия [6]. Такая цепочка может служить, к примеру, моделью углеродных нановолокон, расположенных на поверхности кремниевой подложки. Механические волны, распространяющиеся в такой системе, имеют фильтрующий закон дисперсии, характеризующийся нижней и верхней частотами среза (отсечки). Сходные эффекты возникают

в наноструктурах, в частности в массиве параллельных друг другу наноразмерных кристаллов, выращенных в направлении, перпендикулярном подложке. В работах [7, 8] было установлено, что закон дисперсии волн для такого массива является разрывной функцией частоты. К особенностям термомеханических процессов в дискретных системах относятся негативное тепловое расширение [9, 10] и возможность структурных переходов [11, 12]. Подобное разнообразие тепловых явлений определяет высокую степень сложности описания теплопереноса в дискретных средах.

В идеальном монокристалле аналитические и численные исследования показали существенные отклонения от классической теплопроводности, основанной на законе Фурье [6, 13, 14]. Эти отклонения, в принципе, могут быть уменьшены или даже полностью устранены

ны использованием специальных законов взаимодействия [15–18] или достаточно сложных структур [19, 20]. Однако результаты последних экспериментальных исследований [21–23] показали, что закон теплопроводности Фурье действительно нарушается в низкоразмерных наноструктурах. Это стимулировало интерес к простейшим решеточным моделям, в частности одномерным гармоническим кристаллам, где указанные аномалии наиболее ярко выражены [24–26].

По сравнению с континуальными моделями волнового переноса тепла на нано- и микромасштабном уровне [27–29], протекание тепловых процессов в дискретных средах имеет ряд существенных особенностей. В частности, при резком тепловом воздействии в дискретной системе инициируются высокочастотные колебания, связанные с выравниванием значений потенциальной и кинетической энергии согласно теореме о вириале [4, 30]. В численных экспериментах этот процесс наблюдался достаточно давно [31]. Аналитическое описание процесса, по-видимому, впервые было дано в работе [32], где было установлено, что в одномерном гармоническом кристалле без подложки затухающие колебания энергий описываются функцией Бесселя. Решение, полученное в [32], интересно еще и тем, что на его основе строится описание распространения тепла в кристалле, реализующееся после затухания указанного переходного процесса [33–35]. В частности, в работах [33, 34] получен закон теплопроводности, замещающий закон теплопроводности Фурье для одномерного кристалла.

В данной работе процесс высокочастотных колебаний энергий исследуется на гармонической модели одномерного кристалла на упругом основании, являющейся обобщением рассмотренной ранее модели [32]. Подход, излагаемый в данной статье, основан на работах [32, 35, 36], он позволяет получить динамические уравнения для статистических характеристик кристалла и дать аналитическое описание протекающим в кристалле тепловым процессам. Кристалл рассматривается как стохастическая система, случайность в которую вносится через начальные условия. Для ковариаций скоростей и перемещений частиц выводятся детерминированные динамические уравнения. Решение этих уравнений дает точные аналитические представления и приближенные асимптотические формулы, описывающие процесс перехода системы в состояние термодинамического равновесия. Аналитические результаты подтверждаются компьютерным моделированием.

2. Уравнения динамики цепочки

Рассмотрим цепочку, состоящую из одинаковых масс m , связанных пружинами жесткости C_0 . Цепочка находится на упругом основании жесткости C_1 . Тогда уравнение динамики частиц цепочки имеет вид

$$\ddot{u}_n = (\omega_0^2 \Delta_n^2 - \omega_1^2) u_n, \quad \omega_0 \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{C_0/m}, \quad \omega_1 \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{C_1/m}, \quad (1)$$

где u_n — перемещение n -й частицы; Δ_n^2 — разностный оператор второго порядка:

$$\Delta_n^2 u_n \stackrel{\text{def}}{=} u_{n-1} - 2u_n + u_{n+1}; \quad (2)$$

n — индекс, принимающий произвольные целые значения. Уравнение (1) можно записать в виде

$$\ddot{u}_n = \omega_0^2 (u_{n-1} - (2 + \epsilon) u_n + u_{n+1}), \quad (3)$$

$$\epsilon \stackrel{\text{def}}{=} \omega_1^2 / \omega_0^2 = C_1 / C_0.$$

Для аналитических построений будем считать кристалл бесконечным. Для численного анализа в качестве приближенной модели бесконечного кристалла будет использоваться цепочка, состоящая из $N \gg 1$ частиц, при выполнении условия периодичности: $u_{k+N} = u_k$.

Будем рассматривать начальные условия, соответствующие мгновенному тепловому возмущению:

$$u_n|_{t=0} = 0, \quad \dot{u}_n|_{t=0} = \sigma \rho_n, \quad (4)$$

где ρ_n — независимые случайные величины с нулевым математическим ожиданием и единичной дисперсией; σ — девиация начальных скоростей. Начальные условия (4) могут интерпретироваться как результат воздействия на кристалл ультракороткого лазерного импульса [37]. Будем считать начальное условие (4) статистически однородным по пространству, т.е. все статистические характеристики ρ_n не зависят от n .

3. Определение нелокальных энергий

Впервые для задач переноса тепла в одномерном кристалле ковариационная матрица использовалась в работе [38] при нахождении стационарного потока тепла между горячим и холодным тепловыми резервуарами. Следуя [32, 33], введем нелокальную (ковариационную) кинетическую энергию

$$K_n \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} m \langle v_s v_{s+n} \rangle, \quad (5)$$

где $v_s \stackrel{\text{def}}{=} \dot{u}_s$ — скорость частицы, треугольными скобками обозначено математическое ожидание. Нелокальная потенциальная энергия будет иметь вид

$$\Pi_n \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} C_0 \langle \epsilon_s \epsilon_{s+n} \rangle + \frac{1}{2} C_1 \langle u_s u_{s+n} \rangle, \quad (6)$$

где $\epsilon_s \stackrel{\text{def}}{=} u_{s+1} - u_s$ — деформация связи. Если обычные энергии определяются дисперсиями скоростей и деформаций, то нелокальные — ковариациями¹ этих же величин для пары частиц, значения позиционного индекса которых отличаются на n . Поскольку рассматривается статистически однородное состояние кристалла, то введенные величины не зависят от позиционного индекса s , однако они существенно зависят от корреляционного

¹ Для центрированных случайных величин ковариация представляет собой математическое ожидание их произведения.

индекса n . При $n = 0$ формулы (5) и (6) дают обычные энергии:

$$\begin{aligned} \Pi_0 &= \frac{1}{2} C_0 \langle \epsilon_s^2 \rangle + \frac{1}{2} C_1 \langle u_s^2 \rangle, \quad K_0 = \frac{1}{2} m \langle v_s^2 \rangle, \\ E_0 &= \Pi_0 + K_0. \end{aligned} \quad (7)$$

При компьютерном моделировании для вычисления ковариаций математическое ожидание может приближенно заменяться осреднением по всем возможным значениям s в кристалле.

Использование термина «энергия» для введенных величин связано с тем, что полная нелокальная энергия

$$E_n \stackrel{\text{def}}{=} K_n + \Pi_n$$

остаётся неизменной. Покажем это. Вычислим с использованием уравнения динамики (3) производную нелокальной кинетической энергии по времени:

$$\dot{K}_n = m \langle v_s \dot{v}_{s+n} \rangle = (C_0 \Delta_n^2 - C_1) \langle v_s u_{s+n} \rangle. \quad (8)$$

При выводе (8) использовано тождество симметрии ковариаций [32]:

$$\langle f_{s+n} g_s \rangle = \langle f_s g_{s+n} \rangle. \quad (9)$$

Пользуясь представлением $\langle \epsilon_s \epsilon_{s+n} \rangle = -\Delta_n^2 \langle u_s u_{s+n} \rangle$ [32], вычислим производную потенциальной энергии:

$$\begin{aligned} \dot{\Pi}_n &= -C_0 \Delta_n^2 \langle v_s u_{s+n} \rangle + C_1 \langle v_s u_{s+n} \rangle = \\ &= (C_1 - C_0 \Delta_n^2) \langle v_s u_{s+n} \rangle = -\dot{K}_n. \end{aligned} \quad (10)$$

Из равенства (10) следует, что полная энергия системы сохраняется. Таким образом, для нелокальных энергий E_n выполняется закон сохранения, аналогичный закону сохранения механической энергии.

4. Динамика нелокальных энергий

Получим аналитические уравнения, позволяющие описать высокочастотные колебания потенциальной и кинетической энергии в кристалле. Вычислим вторую производную потенциальной энергии, используя уравнение (1) динамики цепочки:

$$\begin{aligned} \ddot{\Pi}_n &= (C_1 - C_0 \Delta_n^2) (\langle v_s \dot{v}_{s+n} \rangle + \langle \ddot{u}_s u_{s+n} \rangle) = \\ &= 2(\omega_1^2 - \omega_0^2 \Delta_n^2) L_n, \end{aligned} \quad (11)$$

где $L_n \stackrel{\text{def}}{=} K_n - \Pi_n$ — нелокальный лагранжиан системы. Дифференцируя лагранжиан дважды по времени и учитывая, что $\ddot{\Pi}_n = -\dot{K}_n$ (10), получаем

$$\ddot{L}_n = 4(\omega_0^2 \Delta_n^2 - \omega_1^2) L_n, \quad (12)$$

или в явном виде

$$\ddot{L}_n = 4\omega_0^2 (L_{n-1} - (2 + \epsilon) L_n + L_{n+1}). \quad (13)$$

Полученное уравнение для L_n , как и при отсутствии подложки [32], отличается от уравнения динамики цепочки (3) только удвоенным значением парциальной частоты ω_0 .

5. Аналитическое решение

В качестве начальных условий для уравнения (13) выступают начальные значения величин L_n и \dot{L}_n , опре-

деляемые дисперсиями и ковариациями скоростей и перемещений частиц в начальный момент времени. Согласно начальным условиям (4), начальные скорости различных частиц независимы, а начальные перемещения отсутствуют. Тогда, используя определения нелокальных потенциальной и кинетической энергий (5), (6), получим:

$$L_n|_{t=0} = E \delta_n, \quad \dot{L}_n|_{t=0} = 0, \quad (14)$$

где $E = m\sigma^2/2$ — полная энергия цепочки; δ_n — дискретная функция¹.

Таким образом, динамика изменения энергии в стохастической задаче (3), (4) определяется из детерминированной начальной задачи (13), (14). Это означает, что ход случайного процесса полностью определяется начальными условиями (14), а колебания энергии никак не зависят от изначально выбранной функции распределения скоростей.

Решение уравнения (13) при начальных условиях (14) строится методом дискретного преобразования Фурье [39]. В результате получаем

$$L_n = \frac{2E}{\pi} \int_0^{\pi/2} \cos(2\sqrt{4\sin^2 p + \epsilon} \omega_0 t) \cos(2pn) dp. \quad (15)$$

Выражение, близкое к данному, было получено в работе [40] при рассмотрении синусоидального теплового возмущения в кристалле на подложке. Для обычных энергий корреляционный коэффициент n равен нулю. Используя обозначение $L \stackrel{\text{def}}{=} L_0$, получим из (15)

$$L = \frac{E}{\pi} \int_0^{\pi} \cos(2\sqrt{4\sin^2 p + \epsilon} \omega_0 t) dp. \quad (16)$$

После нахождения лагранжиана кинетическая и потенциальная энергия вычисляется по формулам

$$K(t) = E \frac{1+L(t)}{2}, \quad \Pi(t) = E \frac{1-L(t)}{2}. \quad (17)$$

Запишем значения лагранжиана (15) в двух предельных случаях:

$$\begin{aligned} \epsilon = 0: \quad L &= EJ_0(4\omega_0 t) \approx \frac{E}{\sqrt{2\pi\omega_0 t}} \cos(4\omega_0 t - \pi/4), \\ \epsilon = \infty: \quad L &= E \cos(2\omega_1 t). \end{aligned} \quad (18)$$

Здесь использовано тождество $\sqrt{\epsilon} \omega_0 = \omega_1$. В первом случае ($\epsilon = 0$) отсутствует подложка и решение совпадает с решением, полученным в [32]. Лагранжиан, в соответствии со свойствами функции Бесселя, совершает затухающие колебания с частотой и амплитудой, обратно пропорциональной корню из времени (приближенная формула справедлива при не слишком малых временах). Во втором случае ($\epsilon = \infty$) частицы не взаимодействуют друг с другом, а следовательно, все они совершают незатухающие колебания с одинаковой частотой и одинаковой фазой (т.к. все были возбуждены

¹ $\delta_n = 1$ для $n = 0$ и $\delta_n = 0$ для $n \neq 0$.

одновременно при $t = 0$). Энергии как квадратичные функции перемещений и координат совершают колебания с удвоенной частотой $2\omega_1$, где частота ω_1 определяется жесткостью подложки.

Представим решение (15) в удобном для асимптотического анализа виде. Для этого вычислим преобразование Лапласа от подынтегрального выражения (15) по времени. Выполнив обратное преобразование Лапласа, после вычисления интеграла по p получим:

$$L = E \frac{d}{dt} \int_0^t J_0(2\sqrt{4+\epsilon}\omega_0(t-\tau))J_0(2\sqrt{\epsilon}\omega_0\tau) d\tau. \quad (19)$$

Подробнее данные преобразования представлены в приложении П1. Величина $\sqrt{4+\epsilon}\omega_0$ в выражении (19) равна частоте среза верхних частот, а $\sqrt{\epsilon}\omega_0$ — частоте среза нижних частот цепочки на упругом основании (3). Вычисление производной по t приводит к выражению

$$\frac{L}{E} = J_0(2\sqrt{4+\epsilon}\omega_0 t) - 2\sqrt{\epsilon}\omega_0 \times \int_0^t J_0(2\sqrt{4+\epsilon}\omega_0(t-\tau))J_1(2\sqrt{\epsilon}\omega_0\tau) d\tau. \quad (20)$$

6. Мягкое основание

При малых значениях ϵ из формулы (20) можно получить следующее асимптотическое представление лагранжиана в виде суммы двух функций Бесселя (вывод дан в приложении П2):

$$\frac{L}{E} \approx J_0(2\sqrt{4+\epsilon}\omega_0 t) - \frac{1}{2}\sqrt{\epsilon}J_1(2\sqrt{\epsilon}\omega_0 t). \quad (21)$$

Численный анализ показывает, что данная формула имеет незначительную погрешность вплоть до $\epsilon = 1$ (см. приложение П3). На рис. 1 представлено решение (20) и его медленная составляющая $\sqrt{\epsilon}J_1(2\sqrt{\epsilon}\omega_0 t)/2$, на которую накладываются высокочастотные колебания $J_0(2\sqrt{4+\epsilon}\omega_0 t)$. И медленная, и высокочастотная составляющие колебаний затухают, согласно свойствам функций Бесселя, пропорционально $1/\sqrt{t}$.

Из формулы (21) несложно получить ограничения для лагранжиана. Для функции Бесселя выполняется оценка

$$|J_0(2x)| < \frac{1}{\sqrt{\pi x}}, \quad (22)$$

где ограничивающие функции с высокой степенью точности можно считать огибающими. Суммируя ограничения для каждой из функций Бесселя, входящих в (21), получим оценку для $L(t)$:

$$|L(t)| < L_*(t), \quad L_*(t) = \left(\frac{1}{\sqrt{4+\epsilon}} + \frac{\sqrt{\epsilon}}{2} \right) \frac{E}{\sqrt{\pi\omega_0 t}}. \quad (23)$$

Ограничивающие функции $\pm L_*(t)$ показаны пунктирными линиями на рис. 1.

Несложно показать, что выполняется неравенство

$$L_*(t) \geq L_*(t)|_{\epsilon=0} = \frac{E}{\sqrt{2\pi\omega_0 t}}. \quad (24)$$

Согласно (24), выравнивание значений потенциальной и кинетической энергии (затухание колебаний лагранжиана) в кристалле на упругом основании происходит медленнее, чем в свободном кристалле ($\epsilon = 0$). Это хорошо согласуется с тем, что в предельном случае, когда частицы взаимодействуют только с основанием и не взаимодействуют друг с другом ($\epsilon = \infty$), затухание отсутствует вовсе (см. вторую из формул (18)).

В работе [32] было получено, что при отсутствии подложки зависимость лагранжиана от времени описывается дифференциальным уравнением Бесселя

$$\ddot{L} + \frac{1}{t}\dot{L} + 16\omega_0^2 L = 0. \quad (25)$$

Этому уравнению, очевидно, удовлетворяет лагранжиан $L(t) = EJ_0(4\omega_0 t)$, полученный в (18) при $\epsilon = 0$. Получим обобщение формулы (25) в случае мягкого упругого основания. Рассмотрим асимптотическое представление (21). Комбинируя дифференциальные операторы, соответствующие функциям Бесселя нулевого и первого порядка, получим

$$(t^2\partial_t^2 + t\partial_t + 4\epsilon\omega_0^2 t^2 - 1)(16t^2\omega_0^2 + 1)^{-1} \times \times (t^2\partial_t^2 + t\partial_t + 4(4+\epsilon)\omega_0^2 t^2)L(t) = 0. \quad (26)$$

Функция времени $(16t^2\omega_0^2 + 1)^{-1}$ введена для сокращения множителя, возникающего в связи с некоммутативностью указанных операторов. Полученное дифференциальное уравнение (26) имеет четвертый порядок по времени, что характерно для систем с двумя связанными осцилляторами. Кроме того, это уравнение, как и (25), нестационарно и обратимо по времени. Решением уравнения (26) является функция (21) при начальных условиях

$$t = 0: L = E, \quad \dot{L} = -\frac{1}{2}E\omega_0\epsilon, \quad (27)$$

$$\ddot{L} = -2E\omega_0^2(4+\epsilon), \quad \ddot{\ddot{L}} = \frac{3}{2}E\omega_0^3\epsilon^2.$$

Отметим, что, согласно начальным условиям (14), выполняется $\dot{L}|_{t=0} = 0$. Начальные условия (27) задают для $\dot{L}|_{t=0}$ малое, но все же ненулевое значение. Это расхождение связано с приближенным характером форму-

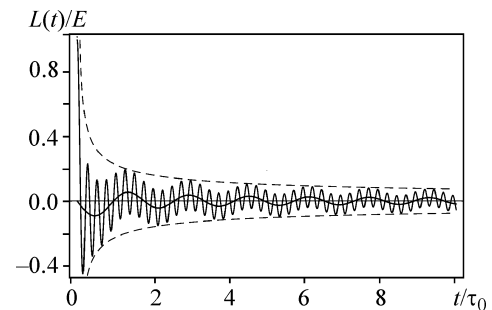


Рис 1. Колебания лагранжиана при мягкой подложке ($\epsilon = 0.1$). Жирной сплошной линией показана медленная составляющая сигнала. Пунктирными линиями показаны ограничивающие функции (23). Масштаб времени $\tau_0 = 2\pi/\omega_0$

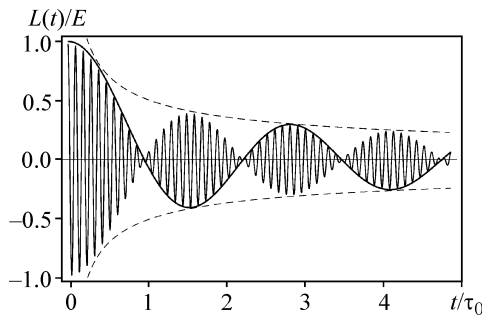


Рис. 2. Колебания лагранжиана при жесткой подложке ($\epsilon = 24$). Сплошной линией показана огибающая, пунктирными — ограничивающие функции (30)

лы (21). В случае $\epsilon = 0$ уравнение (26) может быть частично проинтегрировано, в результате чего для $L(t)$ получаем исходное уравнение (25), соответствующее правой скобке в (26). Таким образом, уравнение колебаний лагранжиана (26) является обобщением уравнения (25) при наличии мягкой подложки. На данный момент не ясно, возможно ли построение аналогичного уравнения для произвольной жесткости подложки.

7. Жесткое основание

Из численного анализа графика функции (20) при больших ϵ следует, что решение может быть приближенно представлено в виде произведения низкочастотной функции Бесселя и высокочастотных гармонических колебаний. Частоты определяются характерными частотами зависимости (19):

$$\Omega_1 \stackrel{\text{def}}{=} (\sqrt{4+\epsilon} + \sqrt{\epsilon})\omega_0, \quad \Omega_2 \stackrel{\text{def}}{=} (\sqrt{4+\epsilon} - \sqrt{\epsilon})\omega_0, \quad (28)$$

где Ω_1, Ω_2 — сумма и разность частот среза для цепочки на подложке. В результате, на основе аналитического и численного анализа формулы (20), эмпирически было получено следующее асимптотическое представление:

$$L \approx EJ_0(\Omega_2 t) \cos(\Omega_1 t). \quad (29)$$

Согласно формуле (29), в системе реализуются биения: огибающая $J_0(\Omega_2 t)$ ограничивает волновой пакет,

заполненный высокочастотным сигналом $\cos(\Omega_1 t)$ (рис. 2). В соответствии со свойствами функций Бесселя, амплитуда огибающей затухает как $1/\sqrt{t}$. Численный анализ показывает, что формула (29) асимптотически точна для больших ϵ (см. приложение ПЗ), однако аналитическое доказательство этого факта требует дополнительного рассмотрения.

Используя формулу (29) и оценку (22), получим ограничения для лагранжиана:

$$|L(t)| < L_*(t), \quad (30)$$

$$L_*(t) = \frac{E}{\sqrt{\Omega_2 t \pi/2}} = \frac{\sqrt{2}E}{\sqrt{\pi(\sqrt{4+\epsilon} - \sqrt{\epsilon})\omega_0 t}}.$$

Ограничивающие функции $\pm L_*(t)$ показаны пунктирными линиями на рис. 2. При $\epsilon \rightarrow \infty$ выполняется $\Omega_1 \rightarrow 2\omega_1, \Omega_2 \rightarrow 2\omega_0^2/\omega_1 \rightarrow 0$, в результате чего из приближенной формулы (29) получаем $L \rightarrow E \cos(2\omega_1 t)$, что совпадает с результатом (18), полученным ранее на основе точной формулы (16). Оценка (23) при $\epsilon \rightarrow \infty$ дает завышенный результат $L_* \rightarrow \infty$. Простейшая оценочная формула, справедливая для сколь угодно больших ϵ , имеет вид

$$L_*(t) = \min \left(E, \frac{E}{\sqrt{\Omega_2 t \pi/2}} \right). \quad (31)$$

8. Аппроксимации и численное решение

Колебания лагранжиана, полученные из решения (20) при различных соотношениях жесткостей подложки и связей между частицами, напоминают колебания в системе с двумя степенями свободы при наличии вязкого трения. Графики на рис. 1 и 2 демонстрируют типичное поведение подобной системы — наложение частот и биения. Однако затухание описывается не экспонентой, как в системе с вязким трением, а степенным законом — амплитуды обратно пропорциональны корню из времени.

На рис. 3, а построено решение (20) при равенстве жесткостей пружин, соединяющих массы между собой и с подложкой. Данный случай удовлетворительно ап-

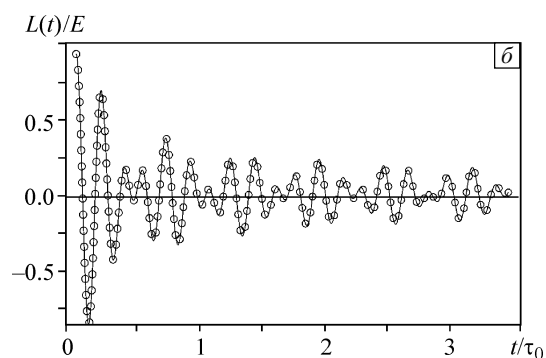
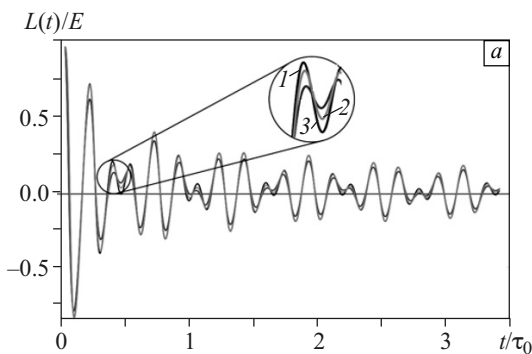


Рис. 3. Колебания энергии в случае равенства жесткостей, $\epsilon = 1 (C_1 = C_0)$: 1 — точное решение (20), 2 — асимптотика (21), 3 — асимптотика (29) (а); сравнение точного решения (сплошная линия) и решения, полученного в результате компьютерного моделирования (точки) (б)

проксимируется каждой из приближенных формул (21) и (29). Основные отличия наблюдаются в экстремумах, где оба асимптотических представления несколько недооценивают точное решение по амплитуде (рис. 3, а). Таким образом, найденные приближенные решения дают хорошую аппроксимацию, решение (21) — для $C_1 \leq C_0$, решение (29) — для $C_1 \geq C_0$, покрывая тем самым все возможные соотношения жесткостей.

Для проверки аналитических результатов было проведено компьютерное моделирование. Система дискретных уравнений динамики цепочки (3) со стохастическими начальными условиями (4) решалась численно методом центральных разностей с шагом интегрирования $0.001\tau_0$, где $\tau_0 = 2\pi/\omega_0$. Начальные скорости задавались генератором случайных чисел с равномерным распределением. Математическое ожидание вычислялось как среднее по кристаллу. Для получения численного решения требуемой точности использовалась цепочка, содержащая 20 000 частиц. Как видно из графика, в принятом масштабе численное и аналитическое решения совпадают. Аналогичное совпадение было получено для случаев мягкой и жесткой подложек.

9. Заключение

В работе рассматриваются дискретные уравнения динамики бесконечного кристалла со стохастическими начальными условиями. Примененный подход позволяет свести стохастическую задачу для перемещений частиц к замкнутой детерминированной задаче для статистических характеристик пар частиц. В результате получено, что лагранжиан системы удовлетворяет уравнению, которым описывается перемещение частицы аналогичной цепочки с детерминированными начальными условиями. В задаче о мгновенном тепловом возмущении начальным условием для указанного уравнения является сдвиг одной частицы на величину E . Ввиду того, что количество частиц бесконечно, с течением времени такая цепочка приходит в равновесие. Следовательно, со временем лагранжиан обращается в ноль — переходный процесс заканчивается выравниванием энергий между кинетической и потенциальной, что согласуется с теоремой о вириале. В целом используемый подход позволяет не только правильно определить параметры термодинамического равновесия, но и аналитически описать неравновесный процесс, приводящий к указанному равновесию.

Для лагранжиана, наряду с точными интегральными формулами, получены приближенные асимптотические формулы для малой и большой жесткости подложки. Из свойств функции Бесселя следует, что амплитуда асимптотических представлений убывает как $1/\sqrt{t}$, что характерно для подобных систем. Так, в работе [32] был получен аналогичный закон затухания энергий при отсутствии подложки. В работе [40] при наличии подлож-

ки данная асимптотика была получена для синусоидального теплового возмущения (однако на значительно более низких частотах, соответствующих медленным тепловым колебаниям). В отличие от результатов работ [32, 40], в полученном решении наблюдаются две частоты колебаний: $\Omega_1 > \Omega_2$. При мягкой подложке (21) это удвоенные верхняя и нижняя частоты среза цепочки на упрругом основании:

$$\Omega_1 = 2\omega_0\sqrt{4+\epsilon}, \quad \Omega_2 = 2\omega_0\sqrt{\epsilon}. \quad (32)$$

При жесткой подложке (21) это сумма и разность верхней и нижней частот среза:

$$\Omega_1 = \omega_0(\sqrt{4+\epsilon} + \sqrt{\epsilon}), \quad \Omega_2 = \omega_0(\sqrt{4+\epsilon} - \sqrt{\epsilon}). \quad (33)$$

В результате при мягкой подложке решение представляет собой высокочастотные колебания, свойственные свободному кристаллу, наложенные на медленные колебания, связанные с упругим основанием (рис. 1). Для жесткой подложки картина иная: в системе наблюдаются биения, для которых высокая несущая частота связана с упругим основанием, а низкочастотная огибающая определяется свойствами и кристалла, и подложки (рис. 2). При близких значениях жесткостей наблюдается промежуточная картина, достаточно хорошо описываемая приближенными решениями, полученными как при малом, так и при большом отношении жесткостей (рис. 3). Построенные решения позволяют оценить время затухания переходного процесса, в частности, из решений следует, что затухание замедляется с увеличением жесткости подложки. По окончании переходного процесса наступает термодинамически равновесное состояние, в котором может использоваться макроскопическое описание распространения тепла. При отсутствии подложки такое описание дано в работах [33, 34], при наличии подложки оно может быть построено по сходной методике с использованием результатов данной работы.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки России (проектная часть гос. задания 9.2091.2014/К). Авторы благодарны всем, кто принимал участие в обсуждении работы, в особенности Е.А. Ивановой, Д.А. Индейцеву, В.А. Кузькину, Н.Ф. Морозову, Э.А. Троппу.

Литература

1. Гольдштейн Р.В., Морозов Н.Ф. Механика деформирования и разрушения наноматериалов и нанотехнологии // Физ. мезомех. — 2007. — Т. 10. — № 5. — С. 17–30.
2. Гольдштейн Р.В., Морозов Н.Ф. Фундаментальные проблемы механики деформируемого твердого тела в наукоемких технологиях // Физ. мезомех. — 2012. — Т. 2. — № 2. — С. 5–13.
3. Кривцов А.М., Морозов Н.Ф. О механических характеристиках наноразмерных объектов // ФТТ. — 2002. — Т. 44. — № 12. — С. 2158–2163.
4. Hoover W.G., Hoover C.G. Simulation and Control of Chaotic Non-equilibrium Systems: Advanced Series in Nonlinear Dynamics: V. 27. — Singapore: World Scientific, 2015. — 324 p.
5. Porubov A.V., Berinskii I.E. Non-linear plane waves in materials having hexagonal internal structure // Int. J. Nonlinear Mech. — 2014. — V. 67. — P. 27–33.

6. Bonetto F., Lebowitz J.L., Rey-Bellet L. Fourier's Law: A Challenge to Theorists // *Mathematical Physics* / Ed. by A. Fokas et al. – London: Imperial College Press, 2000. – P. 128–150.
7. Еремеев В.А., Иванова Е.А., Морозов Н.Ф. Некоторые задачи наномеханики // *Физ. мезомех.* – 2013. – Т. 16. – № 4. – С. 67–73.
8. Eremeyev V.A., Ivanova E.A., Indeitsev D.A. Wave processes in nanostructures formed by nanotube arrays or nanosize crystals // *J. Appl. Mech. Tech. Phys.* – 2010. – V. 51. – No. 4. – P. 569–578.
9. Kuzkin V.A. Comment on “Negative thermal expansion in single-component systems with isotropic interactions” // *J. Phys. Chem.* – 2014. – V. 118. – No. 41. – P. 9793–9794.
10. Kuzkin V.A., Krivtsov A.M. Nonlinear positive/negative thermal expansion and equations of state of a chain with longitudinal and transverse vibrations // *Phys. Solid State. B.* – 2015. – V. 252. – No. 7. – P. 1664–1670.
11. Гольдштейн Р.В., Городцов В.А., Лисовенко Д.С. Мезомеханика многослойных углеродных нанотрубок и наносуов // *Физ. мезомех.* – 2008. – Т. 11. – № 6. – С. 25–42.
12. Podolskaya E.A., Panchenko A.Y., Freidin A.B., Krivtsov A.M. Loss of ellipticity and structural transformations in planar simple crystal lattices // *Acta Mech.* – 2015. – P. 1–17.
13. Lepri S., Livi R., Politi A. Thermal conduction in classical low-dimensional lattices // *Phys. Rep.* – 2003. – V. 377. – P. 1–80.
14. Dhar A. Heat transport in low-dimensional systems // *Adv. Phys.* – 2008. – V. 57. – P. 457–537.
15. Aoki K., Kusnezov D. Bulk properties of anharmonic chains in strong thermal gradients: non-equilibrium ϕ^4 theory // *Phys. Lett. A.* – 2000. – V. 265. – P. 250–256.
16. Gendelman O.V., Savin A.V. Normal heat conductivity of the one-dimensional lattice with periodic potential // *Phys. Rev. Lett.* – 2000. – V. 84. – P. 2381–2384.
17. Giardina C., Livi R., Politi A., Vassalli M. Finite thermal conductivity in 1D lattices // *Phys. Rev. Lett.* – 2000. – V. 84. – P. 2144–2147.
18. Gendelman O.V., Savin A.V. Normal heat conductivity in chains capable of dissociation // *Europhys. Lett.* – 2014. – V. 106. – P. 34004.
19. Bonetto F., Lebowitz J.L., Lukkarinen J. Fourier's law for a harmonic crystal with self-consistent stochastic reservoirs // *J. Stat. Phys.* – 2004. – V. 116. – P. 783–813.
20. Ле-Захаров А.А., Кривцов А.М. Исследование процесса теплопроводности в кристаллах с дефектами методом молекулярной динамики // *Доклады РАН.* – 2008. – Т. 420. – № 1. – С. 45–49.
21. Chang C.W., Okawa D., Garcia H., Majumdar A., Zettl A. Breakdown of Fourier's law in nanotube thermal conductors // *Phys. Rev. Lett.* – 2008. – V. 101. – P. 075903.
22. Xu X., Pereira L.F., Wang Y., Wu J., Zhang K., Zhao X., Bae S., Bui C.T., Xie R., Thong J.T., Hong B.H., Loh K.P., Donadio D., Li B., Ozyilmaz B. Length-dependent thermal conductivity in suspended single-layer graphene // *Nat. Commun.* – 2014. – V. 5. – P. 3689.
23. Hsiao T.K., Huang B.W., Chang H.K., Liou S.C., Chu M.W., Lee S.C., Chang C.W. Micron-scale ballistic thermal conduction and suppressed thermal conductivity in heterogeneously interfaced nanowires // *Phys. Rev. B.* – 2015. – V. 91. – P. 035406.
24. Lepri S., Mejia-Monasterio C., Politi A. Nonequilibrium dynamics of a stochastic model of anomalous heat transport // *J. Phys. A: Math. Theor.* – 2010. – V. 43. – P. 065002 (22 p).
25. Kannan V., Dhar A., Lebowitz J.L. Nonequilibrium stationary state of a harmonic crystal with alternating masses // *Phys. Rev. E.* – 2012. – V. 85. – P. 041118.
26. Dhar A., Dandekar R. Heat transport and current fluctuations in harmonic crystals // *Physica A.* – V. 418. – P. 49–64.
27. Ivanova E.A., Vilchevskaya E.N. Description of Thermal and Microstructural Processes in Generalized Continua: Zhilin's Method and its Modifications // *Generalized Continua as Models for Materials with Multi-scale Effects or Under Multi-field Actions* / Ed. by H. Altenbach, S. Forest, A.M. Krivtsov. – Berlin: Springer, 2013. – P. 179–197.
28. Ivanova E.A. Description of mechanism of thermal conduction and internal damping by means of two component Cosserat continuum // *Acta Mech.* – 2014. – V. 225. – No. 3. – P. 757–795.
29. Tzou D.Y. Macro- to Microscale Heat Transfer: The Lagging Behavior. – Chichester: John Wiley & Sons, 2015. – 566 p.
30. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Механика. Т. 1. Теоретическая физика. – М.: Физматлит, 2004. – 224 с.
31. Allen M.P., Tildesley A.K. Computer Simulation of Liquids. – Oxford: Clarendon Press, 1987. – 385 p.
32. Кривцов А.М. Колебания энергий в одномерном кристалле // *ДАН.* – 2014. – Т. 458. – № 3. – С. 279–281.
33. Кривцов А.М. Распространение тепла в бесконечном одномерном гармоническом кристалле // *ДАН.* – 2015. – Т. 464. – № 2. – С. 162–166.
34. Krivtsov A.M. On unsteady heat conduction in a harmonic crystal. – ArXiv:1509.02506, 2015.
35. Кривцов А.М. Динамика тепловых процессов в одномерных гармонических кристаллах // *Вопросы математической физики и прикладной математики* / Под ред. Э.А. Троппа. – СПб.: ФТИ им. А.Ф. Иоффе (в печати).
36. Krivtsov A.M. Dynamics of Energy Characteristics in One-Dimensional Crystal // *Proc. of XXXIV Summer School «Advanced Problems in Mechanics»*, St.-Petersburg, Russia, 2006. – P. 274–208.
37. Poletkin K.V., Gurzadyan G.G., Shang J., Kulish V. Ultrafast heat transfer on nanoscale in thin gold films // *Appl. Phys. B.* – 2012. – V. 107. – P. 137–143.
38. Rieder Z., Lebowitz J.L., Lieb E. Properties of a harmonic crystal in a stationary nonequilibrium state // *J. Math. Phys.* – 1967. – V. 8. – No. 5. – P. 1073–1078.
39. Слепян Л.И., Яковлев Ю.С. Интегральные преобразования в нестационарных задачах механики. – Л.: Судостроение, 1980. – 343 с.
40. Gendelman O.V., Shvartsman R., Madar B., Savin A.V. Nonstationary heat conduction in one-dimensional models with substrate potential // *Phys. Rev. E.* – 2012. – V. 85. – No. 1. – P. 011105.

Приложения

П1. Вывод представления лагранжиана через свертку

Рассмотрим лагранжиан (16):

$$L = \frac{E}{\pi_0} \int \cos(2\sqrt{4\sin^2 p + \epsilon} \omega_0 t) dp. \quad (\text{П1})$$

Преобразование Лапласа по времени дает

$$\hat{L} = \frac{E}{\pi_0} \int \frac{sdp}{s^2 + 4\epsilon\omega_0^2 + 16\omega_0^2 \sin^2 p}. \quad (\text{П2})$$

После вычисления интеграла получим

$$\hat{L} = Es \hat{f}_1(s) \hat{f}_2(s), \quad (\text{П3})$$

где

$$\hat{f}_1(s) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\sqrt{s^2 + 4\omega_0^2(4 + \epsilon)}}, \quad \hat{f}_2(s) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\sqrt{s^2 + 4\omega_0^2 \epsilon}}. \quad (\text{П4})$$

Обратное преобразование Лапласа для (П3) дает

$$L = E \int_0^t f_1(t - \tau) f_2(\tau) d\tau. \quad (\text{П5})$$

Подставляя в полученную формулу оригиналы

$$f_1(t) = J_0(2\sqrt{4 + \epsilon} \omega_0 t), \quad f_2(t) = J_0(2\sqrt{\epsilon} \omega_0 t), \quad (\text{П6})$$

получим искомую формулу (19).

П2. Вывод асимптотики в случае мягкого основания

Получим асимптотику (21) лагранжиана при малых ϵ . Интегральная свертка в формуле (20) в первом приближении малых ϵ может быть представлена в виде

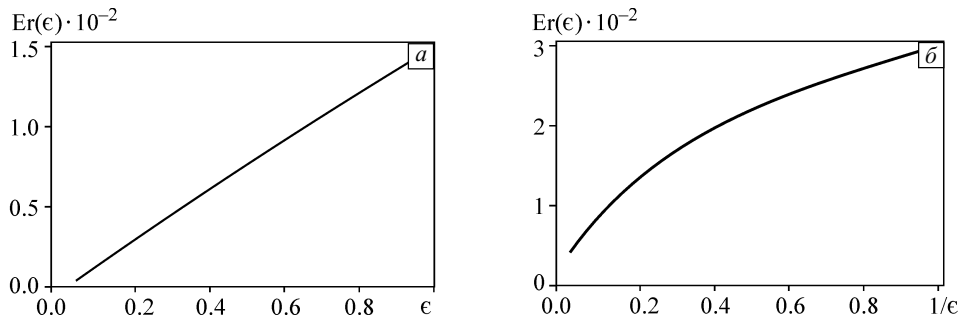


Рис. П1. Зависимость интегральной ошибки асимптотических представлений от ϵ . Ошибка в формулах (21) (а) и (29) (б)

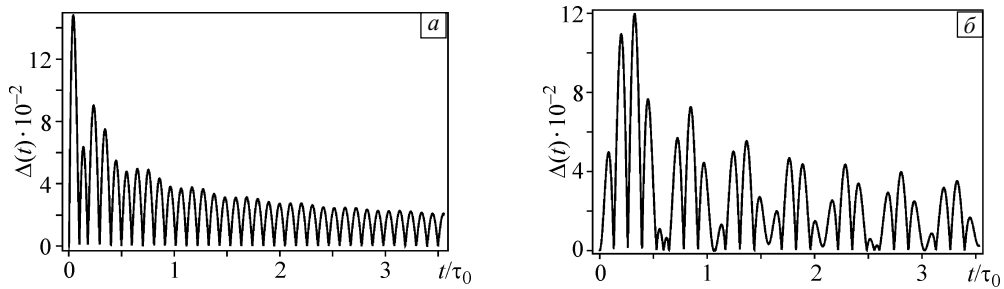


Рис. П2. Зависимость невязки от времени при $\epsilon = 1$ для формул (21) (а) и (29) (б)

$$S = \int_0^T J_0 \left(\frac{2}{\epsilon} (T - \theta) \right) J_1(\theta) d\theta, \quad (\text{П7})$$

$$\theta \stackrel{\text{def}}{=} 2\epsilon\omega_0\tau, \quad T \stackrel{\text{def}}{=} 2\epsilon\omega_0 t, \quad \epsilon = \sqrt{\epsilon}. \quad (\text{П8})$$

Можно показать, что выражение $J_0((2/\epsilon)(T - \theta))$ в (П7) для малых ϵ может быть асимптотически заменено на $\epsilon\delta(T - \theta)$, где δ — дельта-функция Дирака. Тогда

$$S \approx \epsilon \int_0^T \delta(T - \theta) J_1(\theta) d\theta = \frac{\epsilon}{2} J_1(t) = \frac{1}{2} \sqrt{\epsilon} J_1(2\sqrt{\epsilon} \omega_0 t). \quad (\text{П9})$$

Подстановка полученного выражения в (20) дает искомую формулу (21):

$$\frac{L}{E} = J_0(2\sqrt{4 + \epsilon} \omega_0 t) - \frac{1}{2} \sqrt{\epsilon} J_1(2\sqrt{\epsilon} \omega_0 t). \quad (\text{П10})$$

П3. Численная оценка погрешности асимптотических формул

Для оценки погрешности асимптотических выражений (21) и (29) вычислим интегральную ошибку

$$\text{Er}(\epsilon) = \sqrt{\frac{1}{t_{\text{er}}} \int_0^{t_{\text{er}}} \Delta^2(t) dt}, \quad \Delta(t) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{|L_{\text{ex}}(t) - L_{\text{ap}}(t)|}{E}, \quad (\text{П11})$$

где L_{ex} — точное значение лагранжиана; L_{ap} — его приближенное представление (21) или (29); t_{er} — интервал интегрирования. Вычисленная зависимость интегральной ошибки от параметра ϵ представлена на рис. П1. Согласно полученным графикам, при малых и больших ϵ погрешность соответствующих формул стремится к нулю, что свидетельствует в пользу их асимптотической точности. Кроме того, погрешность обеих формул оказывается малой вплоть до $\epsilon = 1$. Следовательно, решение при $\epsilon \leq 1$ может описываться приближенной формулой (21), а при $\epsilon \geq 1$ — приближенной формулой (29). При этом, согласно рис. П2, максимальная погрешность не превышает 1.5 % для формулы (21) и 3 % для формулы (29).

При расчетах, представленных на рис. П1, использовалось $t_{\text{er}} = 3.5\tau_0$, т.е. интервал интегрирования выбирался таким, чтобы захватить несколько первых периодов колебаний. Как показано на рис. П2, ошибка асимптотических представлений убывает со временем, что позволяет для приближенной оценки брать относительно небольшой интервал интегрирования.

Поступила в редакцию
30.12.2015 г.

Сведения об авторах

Бабенков Михаил Борисович, к.ф.-м.н., доц. СПбПУ, mikhail.babenkov@gmail.com
Кривцов Антон Мирославович, д.ф.-м.н., зав. каф. СПбПУ, зав. лаб. ИПМаш РАН, akrivtsov@bk.ru
Цветков Денис Валерьевич, техник, инж. СПбПУ, стаж.-иссл. ИПМаш РАН, dvtsvetkov@ya.ru