

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ
ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ ПЕТРА ВЕЛИКОГО

Физико-механический институт

Высшая школа теоретической механики и математической физики

В. А. Кузькин А. М. Кривцов С. А. Щербинин

ПЕРЕХОДНЫЕ ПРОЦЕССЫ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ
С КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРОЙ

*Рекомендовано отделением федерального учебно-методического
объединения в системе высшего образования по УГСН*

*15.00.00 Машиностроение в качестве учебного пособия при реализации
основных профессиональных образовательных программ высшего
образования по направлению подготовки бакалавров
15.03.03 Прикладная механика*



ПОЛИТЕХ-ПРЕСС

Санкт-Петербургский
политехнический университет
Петра Великого

Санкт-Петербург
2023

ББК 22.2я73
К89

Рецензенты:

Доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник
Института проблем машиноведения РАН
С. Н. Гаверилов

Кандидат физико-математических наук, доцент
Высшей школы теоретической механики и математической физики
Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого
О. С. Лобода

Кузькин В. А. **Переходные процессы в твердых телах с кристаллической структурой** : учеб. пособие / В. А. Кузькин, А. М. Кривцов, С. А. Щербинин. – СПб. : ПОЛИТЕХ-ПРЕСС, 2023. – 79 с.

Излагаются методы аналитического описания двух переходных процессов, реализующихся в гармонических (линейных) кристаллах со случайными начальными условиями: уравнивания кинетической и потенциальной энергий и перераспределения энергии по степеням свободы. Для аналитического описания используется подход, основанный на анализе динамики ковариаций перемещений и скоростей частиц. С использованием матричного аппарата выкладки проводятся для гармонических кристаллов со сложной кристаллической решеткой достаточно общего вида. Выводятся точные формулы, описывающие изменение кинетических энергий (температур), приходящихся на различные степени свободы элементарной ячейки кристалла. Полученные общие формулы применяются для анализа переходных процессов в ряде конкретных одномерных и двумерных кристаллов. Численно исследуется влияние малой нелинейности на рассматриваемые переходные процессы.

Соответствует государственному образовательному стандарту и содержанию направлений подготовки бакалавров и магистров 01.03 «Механика и математическое моделирование» и 15.03 «Прикладная механика».

Предназначено для студентов, специализирующихся в области механики, термодинамики и физики конденсированного состояния.

Ил. 19. Библиогр.: 67 назв.

Печатается по решению

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

© Кузькин В. А., Кривцов А. М.,
Щербинин С. А., 2023

© Санкт-Петербургский политехнический
университет Петра Великого, 2023

ISBN 978-5-7422-8155-9

doi:10.18720/SPBPU/2/id23-448

Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation

PETER THE GREAT
ST. PETERSBURG POLYTECHNIC UNIVERSITY

Institute of Physics and Mechanics
Higher School of Theoretical Mechanics and Mathematical Physics

V. A. Kuzkin A. M. Krivtsov S. A. Shcherbinin

TRANSIENT PROCESSES IN SOLIDS
WITH CRYSTAL STRUCTURE

Recommended by the department of the Federal Education Enhancement Board in the system of higher education for enlarged groups of specializations and areas of training 15.00.00 Mechanical engineering as a training manual for implementation of basic professional higher educational bachelor's degree program 15.03.03 Applied mechanics



POLYTECH PRESS

Peter the Great
St. Petersburg Polytechnic
University

Saint Petersburg
2023

R e v i e w e r s :

Doctor of Sciences in Physical and Mathematical Sciences, Leading Researcher of
Institute for Problems in Mechanical Engineering of the RAS

S. N. Gavrilov

Candidate of Sciences in Physical and Mathematical Sciences, associate professor at
Higher School of Theoretical Mechanics and Mathematical Physics of
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

O. S. Loboda

Kuzkin V. A. Transient processes in solids with crystal structure :

V. A. Kuzkin, A. M. Krivtsov, S. A. Shcherbinin. — St. Petersburg : POLYTECH-
PRESS, 2023. — 79 p.

We present methods for the analytical description of two transient processes in harmonic (linear) crystals with random initial conditions, namely, equilibration of kinetic and potential energies and redistribution of energy over degrees of freedom of the unit cell. For analytical description, an approach based on the analysis of the covariances of particle displacements and velocities is used. Using a matrix formalism, derivations are carried out for harmonic crystals with a complex lattice of a fairly general form. Exact formulas are derived to describe the changes in kinetic energies (temperatures) corresponding to different degrees of freedom of the unit cell. These formulas are used to analyze transient processes in a number of specific one-dimensional and two-dimensional crystals. The effect of weak nonlinearity on the considered transient processes is numerically investigated.

This work corresponds to the state educational standard and the content of bachelor's and master's degree courses 01.03 «Mechanics and mathematical modeling» and 15.03 «Applied mechanics».

The work is suitable for students specializing in mechanics, thermodynamics, and condensed matter physics.

Figures: 19. References: 67 titles.

Printed by the Publishing Council of the Peter the Great St. Petersburg
polytechnic university Academic Council.

ISBN 978-5-7422-8155-9
doi:10.18720/SPBPU/2/id23-448

© Kuzkin V. A., Krivtsov A. M.,
Shcherbinin S. A., 2023
© Peter the Great St. Petersburg
Polytechnic University, 2023

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение	6
1. Решетки с одной степенью свободы на элементарную ячейку	10
1.1. Уравнения движения и начальные условия	10
1.2. Дисперсионное соотношение	13
1.3. Точное решение уравнений движения с использованием дискретного преобразования Фурье	14
1.4. Уравнение динамики ковариаций скоростей	16
1.5. Колебания кинетической энергии	19
1.6. Пример. Цепочка Гука	20
1.7. Пример. Квадратная решетка (поперечные колебания)	21
1.8. Пример. Треугольная решетка (поперечные колебания)	24
1.9. Заключительные замечания	27
2. Решетки с несколькими степенями свободы на элементарную ячейку	29
2.1. Матричная запись уравнений движения	29
2.2. Некоторые свойства эрмитовых матриц	31
2.3. Дисперсионное соотношение	32
2.4. Уравнение динамики ковариаций	35
2.5. Колебания кинетических энергий	37
2.6. Дополнительные законы сохранения	41
2.7. Равновесные значения кинетических энергий	42
2.8. Пример. Цепочка с чередующимися массами и жесткостями	46
2.8.1. Уравнения динамики	46
2.8.2. Дисперсионное соотношение	47
2.8.3. Колебания кинетической энергии	49
2.8.4. Перераспределение кинетической энергии между подрешетками	51
2.9. Пример. Треугольная решетка (колебания в плоскости)	54
2.9.1. Общие соотношения	54
2.9.2. Уравнивание кинетической и потенциальной энергий	55
2.9.3. Вычисление ковариации деформаций в задачах о тепловом расширении	58
2.10. Пример. Решетка графена (поперечные колебания)	59
2.10.1. Уравнения динамики	59
2.10.2. Дисперсионное соотношение	61
2.10.3. Колебания кинетической энергии	62
2.10.4. Перераспределение энергии между подрешетками	64
2.11. О влиянии нелинейности на переходные процессы	65
2.12. Заключительные замечания	67
Заключение	71
Библиографический список	74

ВВЕДЕНИЕ

Одной из актуальных задач механики деформируемого твердого тела является описание термомеханических процессов, при которых материал находится в сильно неравновесном состоянии. В системах, находящихся в тепловом равновесии, кинетическая энергия обычно равномерно распределена по степеням свободы. Этот факт следует из теоремы о равном распределении [1, 2]. Данная теорема позволяет описывать тепловое состояние системы с помощью одного скалярного параметра — кинетической температуры, величины, пропорциональной энергии хаотического теплового движения атомов. Вдали от теплового равновесия кинетические энергии, соответствующие различным степеням свободы, могут существенно отличаться [3–9]. Поэтому во многих работах вводится несколько температур [4, 5, 8, 10, 11]. В частности, известно, что температуры решетки и электронной подсистемы в твердых телах, подверженных лазерному воздействию, могут не совпадать (см., например, обзорную статью [4]). Несколько температур также обнаруживается при молекулярно-динамическом моделировании ударных волн: в работах [3, 6, 7, 12] показано, что кинетические энергии, соответствующие движениям атомов вдоль и поперек направления распространения ударной волны, вблизи ее фронта могут отличаться почти в два раза. В работах [13, 14] рассматривалось распространение тепла в двухатомной гармонической цепочке, помещенной между двумя тепловыми резервуарами с различными температурами. Показано, что температуры подрешеток в неравновесном стационарном состоянии отличаются. Аналогичный эффект наблюдается и в нестационарных процессах. Так, в работе [9] показано, что температуры подрешеток при баллистическом распространении тепла в двухатомной цепочке отличаются, даже если изначально они были заданы равными.

В отсутствие внешних воздействий неравновесная система стремится к тепловому равновесию. Переход к тепловому равновесию сопровождается несколькими процессами: функция распределения скоростей стремится к гауссовой [15–19]; полная энергия перераспределяется между кинетической и потенциальной [15, 20–24]; кинетическая энергия перераспределяется между степенями свободы [3, 22, 24, 25]; энергия перераспределяется между собственными формами системы [26]. Данные процессы, за исключением последнего, происходят как в линейных, так и в нелинейных системах. В линейных (гармонических) кристаллах энергии собственных форм не меняются. Однако поле кинетической температуры в бесконечных гармонических кристаллах стремится стать пространственно однородным и постоянным во времени [16, 18, 25, 27]. Поэтому понятие теплового равновесия широко применяется и к гармоническим кристаллам [17–19, 28–32].

Переход к тепловому равновесию рассматривается во многих работах [15–19, 21, 23, 24, 27, 28, 30–35]. Исследуются такие аспекты данного процесса, как существование равновесного состояния [17], эргодичность [29], стремление функции распределения к нормальному [15, 19, 30, 32], эволюция энтропии [28, 36, 37] и др. В данном учебном пособии мы ограничиваемся исследованием поведения кинетической температуры (температур). Здесь и далее под кинетической температурой понимается величина, пропорциональная кинетической энергии хаотического движения частиц [2, 21, 25].

В литературе представлены два основных подхода к описанию изменения статистических характеристик в гармонических кристаллах. Первый подход использует точное решение уравнений динамики решетки [15, 16, 28, 33, 38]. При известном точном решении кинетическая энергия вычисляется как математическое ожидание кинетической энергии. В частности, в пионерской работе Дж. Клейна и И. Пригожина [15] рассматривался переход к тепловому равновесию в бесконечной гармонической цепочке со случайными начальными условиями. С использованием точного решения, полученного ранее Э. Шредингером [39], в работе [15] было показано, что кинетическая и потенциальная энергии цепочки осциллируют во времени и стремятся к равным равновесным значениям [15]. В рамках второго подхода, используемого в данном пособии, в качестве основных пе-

ременных выступают ковариации¹ скоростей и ковариации перемещений частиц. В случае гармонического кристалла для ковариаций удастся получить замкнутую систему уравнений в стационарном [14, 40, 41] и нестационарном [21, 24, 27, 35, 42] случаях. Решение этой системы описывает, в частности, изменение кинетической температуры во времени. В работах [21, 24, 25, 27, 35, 43, 44] данная идея использована для описания перехода к равновесию в кристаллах с простой (моноатомной) решеткой², таких как одномерные цепочки [21, 23, 43], двумерные треугольная и квадратная решетки [24, 27, 35] и трехмерная гранцентрированная кубическая решетка [45]. Для сложных решеток описание переходных процессов было получено в работах [45–47].

Настоящее пособие является продолжением серии пособий [48–51], разработанных в рамках подхода, согласно которому определяющие уравнения сплошной среды выводятся из дискретной модели — системы взаимодействующих частиц. Идея подхода была предложена П. А. Жилиным и развита в монографии [52]. В работах [48–50] была получена связь между параметрами вещества на атомарном уровне и макроскопическими (упругими и тепловыми) характеристиками материала [48–50]. Дальнейшее применение указанной идеи к аналитическому описанию переходных процессов в гармонических кристаллах отражено в учебном пособии [51], где рассматривались одномерные и двумерные кристаллы простой структуры. При этом в двумерном случае рассматривались только квадратная и треугольная решетки с взаимодействиями ближайших соседей. В настоящем пособии изложены результаты, полученные в работах [24, 27, 35, 46] и позволяющие описывать переходные процессы в простых и сложных решетках с взаимодействием произвольного числа соседей в пространстве произвольной размерности. Аналогичное обобщенное описание медленных процессов, отвечающих за перенос энергии, представлено в пособии [53].

Настоящее пособие составлено следующим образом. В главе 1 приводятся постановка и решение задачи о переходе к равновесию в простых скалярных решетках, в которых каждая частица имеет одну

¹ Ковариацией двух центрированных случайных величин называется математическое ожидание их произведения.

² Решетка называется простой, если она совпадает с собой при перемещении на вектор, соединяющий две любые частицы.

степень свободы. Задача решается для широкого класса линейных решеток с взаимодействием произвольного числа соседей. Решение строится на основе ковариационного подхода, использующего в качестве основных переменных ковариации перемещений и скоростей частиц. Подход позволяет получить, в частности, точные формулы, описывающие поведение кинетической энергии. В качестве примера рассматриваются одномерная цепочка, а также квадратная и треугольная решетки, совершающие поперечные колебания. В главе 2 проводится обобщение полученных результатов на случай простых решеток, частицы которых имеют несколько степеней свободы, и сложных решеток. Для этого используется матричная запись уравнений динамики, позволяющая проводить основные выкладки в форме, не зависящей от числа степеней свободы элементарной ячейки. В качестве примера рассматриваются решетки с двумя степенями свободы на элементарную ячейку: цепочка с чередующимися массами, треугольная решетка, совершающая колебания в плоскости, и решетка графена, совершающая поперечные колебания. Данные примеры расположены в порядке возрастания сложности системы — одномерная сложная, двумерная простая и двумерная сложная решетка. Также в главе 2 численно исследуется влияние малой нелинейности на рассматриваемые переходные процессы.

Данное учебное пособие подготовлено при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 21-71-10129).

1. РЕШЕТКИ С ОДНОЙ СТЕПЕНЬЮ СВОБОДЫ НА ЭЛЕМЕНТАРНУЮ ЯЧЕЙКУ

1.1. Уравнения движения и начальные условия

В рамках главы 1 в качестве модели деформируемого твердого тела будем использовать решетку простой структуры в пространстве размерности $d = 1, 2$, каждая частица которой имеет одну степень свободы. В таком случае перемещение частицы задается скалярной функцией $u(\mathbf{x})$, где \mathbf{x} — радиус-вектор частицы в недеформированном состоянии. Такие решетки в литературе часто называются скалярными.

Далее будем использовать следующее представление для радиус-вектора \mathbf{x} частицы в недеформированном положении:

$$\mathbf{x} = \sum_{j=1}^d z_j \mathbf{e}_j,$$

где \mathbf{e}_j , $j = 1, \dots, d$ — базисные векторы, а z_1, \dots, z_d — целые числа, которые можно использовать в качестве индексов элементарной ячейки. Также будем использовать векторы $\tilde{\mathbf{e}}_j$ сопряженного базиса такие, что $\mathbf{e}_i \cdot \tilde{\mathbf{e}}_j = \delta_{ij}$, где δ_{ij} — символ Кронекера.

Каждая частица взаимодействует с соседями, нумеруемыми индексом α . Векторы \mathbf{a}_α , соединяющие частицу с ее соседями, удовлетворяют соотношению

$$\mathbf{a}_\alpha = -\mathbf{a}_{-\alpha}.$$

При этом автоматически выполняется $\mathbf{a}_0 = 0$.

Будем рассматривать только линейные решетки, в которых сила, действующая на каждую частицу, представляется в виде линейной комбинации перемещений всех частиц, а уравнение движения может

быть записано в виде

$$\ddot{u}(\mathbf{x}) = Du(\mathbf{x}), \quad Du(\mathbf{x}) = \omega_*^2 \sum_{\alpha} b_{\alpha} u(\mathbf{x} + \mathbf{a}_{\alpha}), \quad b_{\alpha} = b_{-\alpha}, \quad (1.1)$$

где ω_* — характерная частота (см., например, формулы (1.2)—(1.4)); D — линейный разностный оператор. С математической точки зрения формула (1.1) — дифференциально-разностное уравнение, или бесконечное множество связанных обыкновенных дифференциальных уравнений.

Уравнения (1.1) описывают поведение целого класса одномерных и двумерных решеток. Например, простейшей моделью, описываемой уравнением (1.1), является одномерная цепочка с взаимодействиями ближайших соседей (цепочка Гука). В таком случае

$$\begin{aligned} Du(\mathbf{x}) &= \omega_*^2 \left(u(\mathbf{x} + \mathbf{a}_1) - 2u(\mathbf{x}) + u(\mathbf{x} + \mathbf{a}_{-1}) \right) \Rightarrow \\ \Rightarrow \quad \omega_* &= \sqrt{\frac{C}{M}}, \quad \mathbf{a}_{\pm 1} = \pm a\mathbf{i}, \quad b_{\pm 1} = 1, \quad b_0 = -2, \end{aligned} \quad (1.2)$$

где \mathbf{i} — единичный вектор, направленный вдоль цепочки; a — равновесное расстояние между частицами; C — жесткость связи; M — масса частиц. Отметим, что уравнение (1.2) при подходящем выборе ω_* также описывает линейризованные поперечные колебания растянутой цепочки с парными взаимодействиями ближайших соседей. Уравнение динамики цепочки с угловыми взаимодействиями, совершающей поперечные колебания, также может быть записано в виде (1.1)

$$\begin{aligned} Du(\mathbf{x}) &= -\omega_*^2 \left(u(\mathbf{x} + \mathbf{a}_2) - 4u(\mathbf{x} + \mathbf{a}_1) + \right. \\ &\quad \left. + 6u(\mathbf{x}) - 4u(\mathbf{x} + \mathbf{a}_{-1}) + u(\mathbf{x} + \mathbf{a}_{-2}) \right) \Rightarrow \\ \Rightarrow \quad \omega_* &= \sqrt{\frac{C_a}{Ma^2}}, \quad \mathbf{a}_{\pm 1} = \pm a\mathbf{i}, \quad \mathbf{a}_{\pm 2} = \pm 2a\mathbf{i}, \\ &\quad b_0 = -6, \quad b_{\pm 1} = 4, \quad b_{\pm 2} = -1, \end{aligned} \quad (1.3)$$

где C_a — жесткость угловой пружинки. Модель (1.3) может использоваться, например, для описания поперечных колебаний карбина,

нанопроволок или алмазных нанонитей.

Простейшая двумерная модель, описываемая уравнением (1.1), — растянутая квадратная решетка с взаимодействиями ближайших соседей, совершающая поперечные колебания. В таком случае

$$\begin{aligned}
 Du(\mathbf{x}) &= \omega_*^2 \left(u(\mathbf{x} + \mathbf{a}_1) + u(\mathbf{x} + \mathbf{a}_2) - \right. \\
 &\quad \left. - 4u(\mathbf{x}) + u(\mathbf{x} + \mathbf{a}_{-1}) + u(\mathbf{x} + \mathbf{a}_{-2}) \right) \Rightarrow \\
 \Rightarrow \omega_* &= \sqrt{\frac{F}{Ma}}, \quad \mathbf{a}_{\pm 1} = \pm a\mathbf{i}, \quad \mathbf{a}_{\pm 2} = \pm a\mathbf{j}, \\
 b_{\pm 1} &= b_{\pm 2} = 1, \quad b_0 = -4,
 \end{aligned} \tag{1.4}$$

где \mathbf{i}, \mathbf{j} — ортогональные единичные векторы; F — величина силы натяжения в равновесии. Двумерные решетки могут рассматриваться как простейшие модели поперечных колебаний двумерных материалов, таких как графен, дисульфид молибдена, нитрид бора и др.

В общем случае правильный подбор параметров \mathbf{a}_α и b_α в уравнении (1.1) позволяет описывать линейаризованные колебания одномерных и двумерных скалярных решеток с парными и многочастичными взаимодействиями произвольного числа соседей. Уравнение (1.1) также описывает некоторые системы с моментными взаимодействиями [54], например, цепочку из твердых тел, соединенных упругими связями и фиксированными трансляционными степенями свободы [55]. Также можно рассматривать поперечные колебания двумерных решеток с моментными взаимодействиями при условии, что вращательные степени свободы зафиксированы.

Будем рассматривать следующие стохастические начальные условия, типичные для молекулярно-динамического моделирования:

$$\begin{aligned}
 u(\mathbf{x}) &= 0, \quad v(\mathbf{x}) = v_0(\mathbf{x}), \\
 \langle v_0(\mathbf{x}) \rangle &= 0, \quad \langle v_0(\mathbf{x})v_0(\mathbf{y}) \rangle = \langle v_0^2(\mathbf{x}) \rangle \delta_D(\mathbf{x} - \mathbf{y}),
 \end{aligned} \tag{1.5}$$

где $v = \dot{u}$, начальные скорости $v_0(\mathbf{x})$ — некоррелированные случайные величины с нулевым математическим ожиданием; $\delta_D(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = 1$ при $\mathbf{x} = \mathbf{y}$, в противном случае $\delta_D(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = 0$. Здесь и далее угловыми скобками $\langle \dots \rangle$ обозначается математическое ожидание. В расчетах

оно заменяется на среднее по реализациям с различными начальными условиями.

Начальные условия (1.5) соответствуют некоторому начальному распределению кинетической энергии (температуры) в решетке и могут рассматриваться, например, как результат воздействия на кристалл ультракороткого лазерного импульса. Заметим, что при таких начальных условиях полная энергия системы равна начальной кинетической энергии, а начальная потенциальная энергия равна нулю. Движение частиц приведет к перераспределению энергии между кинетической и потенциальной формами. Описанию данного переходного процесса посвящена глава 1 данного учебного пособия.

1.2. Дисперсионное соотношение

Распространение волн в решетке определяется ее дисперсионным соотношением — зависимостью частоты волны от волнового вектора. Как будет показано далее, дисперсионное соотношение играет ключевую роль и при описании переходных процессов в решетках.

Построим дисперсионное соотношение для произвольной скалярной решетки, описываемой уравнением движения (1.1). Для этого будем искать решение в виде

$$u = Ae^{i(\omega t + \mathbf{k} \cdot \mathbf{x})}, \quad (1.6)$$

где \mathbf{k} представляет собой волновой вектор:

$$\mathbf{k} = \sum_{j=1}^d p_j \tilde{\mathbf{e}}_j, \quad (1.7)$$

где $\tilde{\mathbf{e}}_j$ — векторы сопряженного базиса; $p_j \in [0; 2\pi]$.

Подстановка (1.6) в уравнения (1.1) приводит к системе независимых линейных уравнений с нулевой правой частью. Данные уравнения имеют нетривиальное решение при выполнении соотношения

$$\omega^2(\mathbf{k}) = -\omega_*^2 \left(b_0 + 2 \sum_{\alpha>0} b_\alpha \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_\alpha) \right). \quad (1.8)$$

Формула (1.8) дает дисперсионное соотношение для рассматриваемой

мых скалярных решеток, описываемых уравнением движения (1.1).

Отметим два важных свойства дисперсионного соотношения (1.8). Первое свойство — симметрия относительно замены \mathbf{k} на $-\mathbf{k}$:

$$\omega^2(-\mathbf{k}) = \omega^2(\mathbf{k}). \quad (1.9)$$

Второе свойство — периодичность. Функция $\omega^2(p_1, p_2, \dots, p_d)$ является 2π -периодической:

$$\omega^2(p_1, p_2, \dots, p_d) = \omega^2(p_1 + 2C_1\pi, p_2 + 2C_2\pi, \dots, p_d + 2C_d\pi),$$

где C_i — целые числа.

Таким образом, дисперсионное соотношение для скалярных решеток, описываемых уравнением движения (1.1), определяется формулой (1.8). Примеры дисперсионных соотношений для нескольких конкретных решеток приведены ниже (см. формулы (1.38), (1.45)).

1.3. Точное решение уравнений движения с использованием дискретного преобразования Фурье

Получим точное решение уравнений движения (1.1) со следующими начальными условиями общего вида:

$$u(\mathbf{x}) = u_0(\mathbf{x}), \quad v(\mathbf{x}) = v_0(\mathbf{x}). \quad (1.10)$$

Для этого воспользуемся дискретным преобразованием Фурье. Это преобразование обычно используется для решения задач с периодическими граничными условиями. В данном учебном пособии мы ограничиваемся предельным случаем, когда размер ячейки периодичности стремится к бесконечности. Влияние конечности кристалла на переходные процессы рассматривается, например, в работе [56].

Прямое и обратное дискретное преобразования Фурье по переменным z_1, \dots, z_d для бесконечной решетки определяются формулами

$$\hat{u}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{x}} u(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}, \quad u(\mathbf{x}) = \int_{\mathbf{k}} \hat{u}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} d\mathbf{k}, \quad (1.11)$$

где $\hat{u}(\mathbf{k})$ — Фурье-образ u ; $i^2 = -1$; \mathbf{k} — волновой вектор (1.7); для краткости используются обозначения

$$\int_{\mathbf{k}} \dots d\mathbf{k} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{(2\pi)^d} \int_0^{2\pi} \dots \int_0^{2\pi} \dots dp_1 \dots dp_d, \quad (1.12)$$

$$\sum_{\mathbf{x}} \dots \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{z_1=-\infty}^{+\infty} \dots \sum_{z_d=-\infty}^{+\infty} \dots$$

Основным свойством дискретного преобразования Фурье, необходимым для решения уравнений типа (1.1), является свойство сдвига:

$$\Phi(u(\mathbf{x} + \mathbf{a}_\alpha)) = \Phi(u(\mathbf{x})) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_\alpha}, \quad (1.13)$$

где Φ – оператор Фурье-преобразования. С использованием данного тождества нетрудно показать, что выполняются следующие соотношения:

$$\Phi(Du) = \hat{D}\hat{u}, \quad \Phi(D^2u) = \hat{D}\Phi(Du) = \hat{D}^2\hat{u}, \quad (1.14)$$

$$\hat{D} = \omega_*^2 \sum_{\alpha} b_{\alpha} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_{\alpha}}.$$

Отметим, что \hat{D} с точностью до знака совпадает с дисперсионным соотношением (1.8). Применяя дискретное преобразование Фурье к уравнению (1.1), получим

$$\ddot{\hat{u}}(\mathbf{k}) = -\omega^2(\mathbf{k})\hat{u}(\mathbf{k}), \quad \omega^2 = -\hat{D}. \quad (1.15)$$

Дискретное преобразование Фурье позволяет перейти от системы связанных обыкновенных дифференциальных уравнений (1.1) для перемещений к системе независимых уравнений (1.15) для Фурье-образов перемещений. Отметим, что (1.15) представляет собой уравнение колебаний гармонического осциллятора.

Применим дискретное преобразование Фурье к начальным условиям:

$$\hat{u}(\mathbf{k}) = \hat{u}_0 = \Phi(u_0(\mathbf{x})), \quad \hat{v}(\mathbf{k}) = \hat{v}_0 = \Phi(v_0(\mathbf{x})). \quad (1.16)$$

Решая уравнения (1.15) с начальными условиями (1.16), получим

$$\hat{u} = \hat{u}_0 \cos(\omega t) + \frac{\hat{v}_0}{\omega} \sin(\omega t), \quad \hat{v} = \hat{v}_0 \cos(\omega t) - \omega \hat{u}_0 \sin(\omega t).$$

Применяя обратное преобразование Фурье, имеем

$$\begin{aligned} u(\mathbf{x}) &= \int_{\mathbf{k}} \left(\hat{u}_0 \cos(\omega(\mathbf{k})t) + \frac{\hat{v}_0}{\omega(\mathbf{k})} \sin(\omega(\mathbf{k})t) \right) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} d\mathbf{k}, \\ v(\mathbf{x}) &= \int_{\mathbf{k}} \left(\hat{v}_0 \cos(\omega(\mathbf{k})t) - \omega(\mathbf{k}) \hat{u}_0 \sin(\omega(\mathbf{k})t) \right) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} d\mathbf{k}. \end{aligned} \quad (1.17)$$

Формула (1.17) дает формальное решение уравнений движения (1.1) с начальными условиями (1.10).

Таким образом, уравнение (1.1) с начальными условиями (1.10) может быть решено аналитически. Получающиеся в результате решения скорости и перемещения частиц (1.17) являются случайными величинами. Точное решение (1.17) позволяет вычислить все интересные характеристики кристалла, включая его кинетическую и потенциальную энергии и их математические ожидания. Такой подход используется в работе [9]. В данном учебном пособии будет использоваться другой подход, основанный на анализе ковариаций перемещений и скоростей частиц. Далее будет показано, что ковариационный анализ позволяет получить, в частности, ряд дополнительных законов сохранения, вывод которых в рамках подхода [9] представляется более сложным.

1.4. Уравнение динамики ковариаций скоростей

В силу случайности рассматриваемых начальных условий (1.5) скорости частиц в любой момент времени также являются случайными величинами. Далее нас будут интересовать не случайные величины, а статистические характеристики, например, математическое ожидание кинетической энергии, которое может трактоваться как величина, пропорциональная кинетической температуре. Для того чтобы ввести статистические характеристики, рассматривается бесконечное множество реализаций начальных условий (2.3).

Введем ковариации скоростей частиц с радиус-векторами \mathbf{x} и \mathbf{y} :

$$\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \langle v(\mathbf{x})v(\mathbf{y}) \rangle. \quad (1.18)$$

Ковариация скоростей связана с математическим ожиданием кинетической энергии T (величиной, пропорциональной кинетической температуре) следующим соотношением:

$$T(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}M \langle v(\mathbf{x})^2 \rangle = \frac{1}{2}M\kappa|_{\mathbf{x}=\mathbf{y}}, \quad (1.19)$$

где M — масса частицы. Получим уравнение для ковариаций скоростей. Заметим, что скорости частиц также удовлетворяют уравнению (1.1):

$$\ddot{v}(\mathbf{x}) = Dv(\mathbf{x}). \quad (1.20)$$

Введем вспомогательную величину — ковариацию ускорений

$$\zeta = \langle \dot{v}(\mathbf{x})\dot{v}(\mathbf{y}) \rangle.$$

Дифференцирование ковариаций скоростей κ и ковариаций ускорений ζ по времени с учетом уравнений движения (1.1), (1.20) дает

$$\begin{aligned} \dot{\kappa} &= (D_x + D_y)\kappa + 2\zeta, & \dot{\zeta} &= (D_x + D_y)\zeta + 2D_x D_y \kappa, \\ D_x \kappa &= \omega_*^2 \sum_{\alpha} b_{\alpha} \kappa(\mathbf{x} + \mathbf{a}_{\alpha}, \mathbf{y}), & D_y \kappa &= \omega_*^2 \sum_{\alpha} b_{\alpha} \kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y} + \mathbf{a}_{\alpha}). \end{aligned} \quad (1.21)$$

Исключая ковариации ускорений ζ из системы (1.21), получим

$$\ddot{\kappa} - 2(D_x + D_y)\dot{\kappa} + (D_x - D_y)^2 \kappa = 0. \quad (1.22)$$

Уравнение (1.22) в точности описывает, в том числе, поведение поля кинетической энергии (кинетической температуры) в любой гармонической скалярной решетке, описываемой уравнением динамики (1.1).

Рассмотрим еще один вывод уравнения (1.22) для ковариаций скоростей, использованный, например, в работе [44]. Введем ковариации скоростей, перемещений и смешанные ковариации:

$$\begin{aligned} \xi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) &= \langle u(\mathbf{x})u(\mathbf{y}) \rangle, \\ v(\mathbf{x}, \mathbf{y}) &= \langle u(\mathbf{x})v(\mathbf{y}) \rangle, \\ v(\mathbf{x}, \mathbf{y})^* &= \langle v(\mathbf{x})u(\mathbf{y}) \rangle. \end{aligned} \quad (1.23)$$

Дифференцирование ковариаций по времени с учетом уравнений движения дает

$$\begin{aligned}\dot{\xi} &= \mathbf{v} + \mathbf{v}^*, & \dot{\mathbf{v}} &= D_y \xi + \kappa, & \dot{\kappa} &= D_x \mathbf{v} + D_y \mathbf{v}^*, \\ \ddot{\xi} &= D_x \xi + D_y \xi + 2\kappa, & \ddot{\kappa} &= D_x \kappa + D_y \kappa + 2D_x D_y \xi.\end{aligned}\quad (1.24)$$

Первое из уравнений (1.24) позволяет выразить κ через ξ :

$$\kappa = \frac{1}{2} \left(\ddot{\xi} - D_x \xi - D_y \xi \right). \quad (1.25)$$

Следовательно, ковариации скоростей и перемещений связаны дифференциально-разностным оператором, стоящим в правой части (1.25). Применяя данный оператор к первому из уравнений (1.24), получим уравнение (1.22) для κ . Отметим, что ковариации перемещений ξ также удовлетворяют уравнению (1.22).

Начальные условия κ уравнению (1.22) для ковариаций скоростей, соответствующие начальным условиям для частиц (1.5), имеют вид

$$\begin{aligned}\kappa &= \frac{2}{M} T_0(\mathbf{x}) \delta_D(\mathbf{x} - \mathbf{y}), & \dot{\kappa} &= 0, \\ \ddot{\kappa} &= \frac{2}{M} (D_x + D_y) \left(T_0(\mathbf{x}) \delta_D(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \right), & \ddot{\kappa} &= 0, \\ T_0(\mathbf{x}) &= \frac{1}{2} M \left\langle v_0(\mathbf{x})^2 \right\rangle,\end{aligned}\quad (1.26)$$

где $T_0(\mathbf{x})$ — пространственное распределение начальной кинетической энергии (температуры); функция $\delta_D(\mathbf{x} - \mathbf{y})$ равна единице при $\mathbf{x} = \mathbf{y}$ и нулю при $\mathbf{x} \neq \mathbf{y}$.

Таким образом, получено уравнение (1.22) с детерминированными начальными условиями (1.26). Данное уравнение позволяет вычислить статистические характеристики (ковариации) скоростей, получающихся при решении уравнений движения (1.1) со случайными начальными условиями (1.5). В частности, уравнение описывает изменение пространственного распределения кинетической энергии, пропорциональной кинетической температуре.

Аналогичный метод вывода уравнений для ковариаций может также применяться для описания тепловых процессов в цепочках с консервативным шумом [42]. Однако для получения замкнутой системы уравнений необходимо дополнительно рассматривать поведе-

ние ковариаций перемещений и смешанных ковариаций (1.23).

1.5. Колебания кинетической энергии

Рассмотрим однородное начальное распределение кинетической энергии в решетке. Сделаем замену переменных

$$(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \rightarrow (\mathbf{r}, \mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad \mathbf{r} = \frac{\mathbf{x} + \mathbf{y}}{2}. \quad (1.27)$$

Тогда ковариация скоростей представляется в виде $\kappa(\mathbf{r}, \mathbf{x} - \mathbf{y})$. При однородных начальных условиях ковариации не зависят от пространственной координаты \mathbf{r} . Тогда для разностных операторов D_x, D_y выполняются соотношения

$$D_x = D_y = D_{x-y}, \quad D_{x-y} = \omega_*^2 \sum_{\alpha} b_{\alpha} S_{\alpha}, \quad (1.28)$$

$$S_{\alpha} \kappa = \kappa(\mathbf{r}, \mathbf{x} - \mathbf{y} + \mathbf{a}_{\alpha}).$$

Подстановка формулы (1.28) в (1.22), (1.26) дает уравнение

$$\ddot{\mathbf{k}} - 4D_{x-y}\ddot{\mathbf{k}} = 0 \quad (1.29)$$

с начальными условиями

$$\kappa = \frac{2}{M} T_0 \delta_D(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad \dot{\kappa} = 0, \quad \ddot{\kappa} = \frac{4}{M} T_0 D_{x-y} \delta_D(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad \ddot{\ddot{\kappa}} = 0. \quad (1.30)$$

Начальная задача (1.29), (1.30) в точности описывает изменение кинетической энергии в решетке.

Решение уравнения (1.29) строится с использованием дискретного преобразования Фурье по вектору $\mathbf{x} - \mathbf{y}$. Для рассматриваемых простых решеток векторы $\mathbf{x} - \mathbf{y}$ представляются в виде

$$\mathbf{x} - \mathbf{y} = \sum_{j=1}^d z_j \mathbf{e}_j,$$

где \mathbf{e}_j , $j = 1, \dots, d$ — базисные векторы решетки; d — размерность пространства; z_j — целые числа. Применяя в уравнении (1.29) дискретное преобразование Фурье (1.11) по z_j , получим уравнение для образов

$$\overset{\dots}{\hat{\mathbf{k}}} + 4\omega^2\overset{\ddot{}}{\hat{\mathbf{k}}} = 0, \quad (1.31)$$

где $\omega = \omega(\mathbf{k})$ — дисперсионное соотношение для решетки (1.8), \mathbf{k} — волновой вектор. Начальные условия для образов получаются после применения дискретного преобразования Фурье к формуле (1.30):

$$\hat{\mathbf{k}} = \frac{2}{M}T_0, \quad \dot{\hat{\mathbf{k}}} = 0, \quad \overset{\ddot{}}{\hat{\mathbf{k}}} = -\frac{4}{M}T_0\omega^2, \quad \overset{\dots}{\hat{\mathbf{k}}} = 0. \quad (1.32)$$

Решая уравнение (1.31) с начальными условиями (1.32) и применяя обратное дискретное преобразование Фурье, получим

$$T = \frac{T_0}{2} \left[1 + \int_{\mathbf{k}} \cos(2\omega(\mathbf{k})t) d\mathbf{k} \right]. \quad (1.33)$$

Формула (1.33) в точности описывает изменение кинетической энергии. Кинетическая энергия совершает высокочастотные колебания, связанные с переходом части энергии в потенциальную. Подынтегральное выражение в формуле (1.33) меняет знак и осциллирует с частотой, пропорциональной времени. Следовательно, второе слагаемое в скобках стремится к нулю¹, а кинетическая энергия — к половине начального значения.

1.6. Пример. Цепочка Гука

Рассмотрим одномерную цепочку, состоящую из одинаковых частиц, взаимодействующих с ближайшими соседями посредством одинаковых линейных пружинок (цепочку Гука [58]). Уравнения движения цепочки Гука имеют вид

$$\ddot{u}(x) = \omega_*^2 \left(u(x+a) - 2u(x) + u(x-a) \right),$$

где a — равновесное расстояние. Осцилляции кинетической энергии в такой системе описываются интегралом (1.33). Подставляя пара-

¹ Данное утверждение, вообще говоря, требует строгого доказательства, которое выходит за рамки данного учебного пособия. Отметим только, что для исследования поведения интеграла (1.33) могут использоваться хорошо разработанные асимптотические методы, такие как метод стационарной фазы [57].

метры (1.2) в формулу (1.33) и проводя интегрирование, получим

$$T = \frac{T_0}{2} \left(1 + J_0(4\omega_* t) \right), \quad (1.34)$$

где J_0 — функция Бесселя первого рода. На больших временах данную формулу можно упростить, применяя известную асимптотическую формулу для функции Бесселя:

$$T \approx \frac{T_0}{2} \left(1 + \frac{1}{\sqrt{2\pi\omega_* t}} \cos \left(4\omega_* t - \frac{\pi}{4} \right) \right).$$

Формула (1.34) показывает, что отклонение энергии от среднего значения совершает колебания с частотой ω_* и стремится к нулю обратно пропорционально корню из времени. Отметим, что формула (1.34) была получена другим способом в работе [21].

1.7. Пример. Квадратная решетка (поперечные колебания)

Рассмотрим изменение кинетической энергии в растянутой квадратной решетке, совершающей поперечные колебания. Радиус-векторы частиц в недеформированном состоянии задаются формулой

$$\mathbf{x}_{n,m} = a(n\mathbf{i} + m\mathbf{j}),$$

где \mathbf{i}, \mathbf{j} — ортогональные единичные векторы; a — начальное расстояние между ближайшими соседями. Частицы соединены с соседями линейными пружинками. Равновесная длина пружинок меньше a , т. е. решетка растянута (в нерастянутой решетке поперечные колебания являются существенно нелинейными). Тогда линеаризованные уравнения поперечных колебаний имеют вид

$$\begin{aligned} \ddot{u}(\mathbf{x}) &= \omega_*^2 \sum_{\alpha=\pm 2; \pm 1} \left(u(\mathbf{x} + \mathbf{a}_\alpha) - u(\mathbf{x}) \right), \\ \mathbf{a}_{\pm 1} &= \pm a\mathbf{i}, \quad \mathbf{a}_{\pm 2} = \pm a\mathbf{j}, \end{aligned} \quad (1.35)$$

где $u(\mathbf{x})$ — проекция вектора перемещения на нормаль к плоскости решетки. Видно, что уравнение (1.35) является частным случаем

уравнения (1.1), где параметры ω_* , b_α определяются формулой (1.4):

$$\omega_* = \sqrt{\frac{F}{Ma}}, \quad b_{\pm 1} = b_{\pm 2} = 1, \quad b_0 = -4, \quad (1.36)$$

где F — сила натяжения; M — масса частицы.

Для программной реализации численного интегрирования уравнений (1.35) удобно также использовать следующую индексную запись:

$$\ddot{u}_{n,m} = \omega_*^2 (u_{n+1,m} + u_{n,m+1} - 4u_{n,m} + u_{n-1,m} + u_{n,m-1}), \quad (1.37)$$

где $u_{n,m} = u(\mathbf{x}_{n,m})$.

Для построения дисперсионного соотношения достаточно подставить конкретные выражения (1.36) для параметров b_α и векторов \mathbf{a}_α в общую формулу (1.8). В результате подстановки получим:

$$\omega = 2\omega_* \sqrt{\sin^2 \frac{p_1}{2} + \sin^2 \frac{p_2}{2}}, \quad \mathbf{k} = \frac{1}{a} (p_1 \mathbf{i} + p_2 \mathbf{j}). \quad (1.38)$$

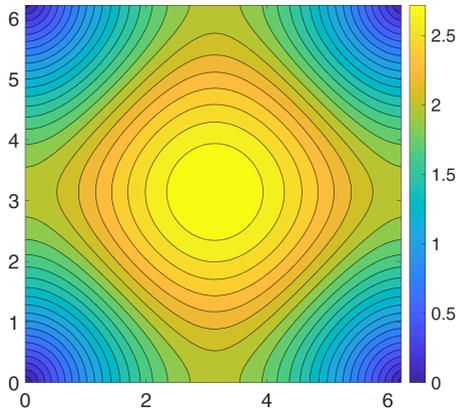


Рис. 1.1. Дисперсионная поверхность $\omega(p_1, p_2)/\omega_*$ для квадратной решетки, совершающей поперечные колебания

Дисперсионная поверхность (1.38) показана на рис. 1.1. Видно, что она симметрична относительно замены p_1 на p_2 . Данная симметрия

является следствием симметрии решетки. Она позволяет при описании колебаний кинетической температуры ограничиться рассмотрением треугольника $p_2[0; p_1]$, $p_1 \in [0; \pi]$. Отметим, что в данном треугольнике компоненты групповой скорости $\frac{\partial \omega}{\partial p_1}$ и $\frac{\partial \omega}{\partial p_2}$ одновременно обращаются в ноль в двух точках: $p_1 = \pi, p_2 = 0$ и $p_1 = p_2 = \pi$. Соответствующие частоты имеют вид

$$\Omega_1 = 2\omega_*, \quad \Omega_2 = 2\sqrt{2}\omega_*.$$

По-видимому, основные колебания кинетической температуры происходят на данных частотах (удвоенных). Строгое доказательство этого факта на основе анализа асимптотики интеграла (1.40) выходит за рамки данного учебного пособия.

Начальные условия для уравнений движения частиц, соответствующие однородному начальному распределению кинетической энергии T_0 , имеют вид

$$u_{n,m} = 0, \quad v_{n,m} = v_0 \rho_{n,m}, \quad \langle \rho_{n,m} \rangle = 0, \quad \langle \rho_{n,m} \rho_{s,p} \rangle = \delta_{n,s} \delta_{m,p}, \quad (1.39)$$

где $\rho_{n,m}$ — некоррелированные случайные числа с нулевым математическим ожиданием и единичной дисперсией, $v_0^2 = 2T_0/M$. В таком случае начальные кинетическая и потенциальная энергии не равны. Уравнивание энергий приводит к колебаниям кинетической энергии, описываемым формулой (1.33).

Подстановка дисперсионного соотношения (1.38) в формулу (1.33) дает

$$T = \frac{T_0}{2} \left[1 + \frac{1}{\pi^2} \int_0^\pi \int_0^\pi \cos \left(4\omega_* t \sqrt{\sin^2 \frac{p_1}{2} + \sin^2 \frac{p_2}{2}} \right) dp_1 dp_2 \right]. \quad (1.40)$$

Для проверки формулы (1.40) проведем сравнение с результатами численного решения уравнений движения (1.35). Для численного интегрирования используется метод центральных разностей с шагом $0.0025\tau_*$, $\tau_* = 2\pi/\omega_*$. В обоих направлениях ставятся периодические граничные условия. Ячейка периодичности содержит 10^6 частиц. В процессе моделирования вычисляется полная кинетическая энергия системы (см. рис. 1.2). При таком количестве частиц осреднение по реализациям не требуется. В частности, точки на графике — результат всего одной реализации. При вычислении темпе-

ратуры по формуле (1.40) интеграл вычисляется с помощью метода прямоугольников. Для этого область интегрирования покрывается квадратной сеткой, содержащей 25000 узлов. Дальнейшее увеличение числа узлов не влияет на вид графика. Из рис. 1.2 видно, что аналитическое решение (1.40) совпадает с результатами численного решения уравнений динамики решетки (1.35). Стандартная ошиб-

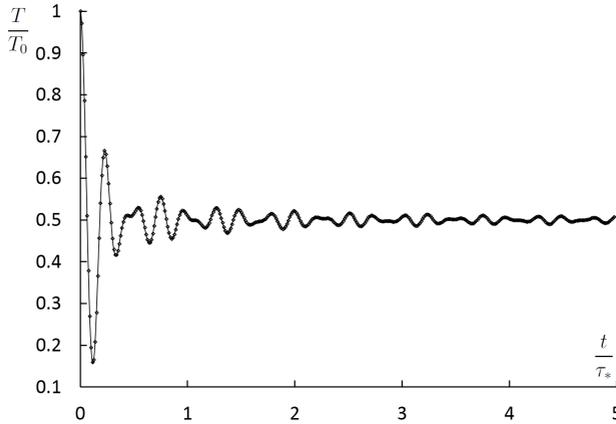


Рис. 1.2. Осцилляции кинетической энергии в растянутой квадратной решетке, совершающей поперечные колебания. Сплошная линия — аналитическое решение (1.40); ромбы — численное решение уравнений динамики решетки (1.35)

ка среднего при определении кинетической энергии порядка размера точек на графике. Колебания кинетической энергии затухают со временем. Характерное время данного процесса составляет порядка нескольких периодов τ_* . Домножая энергию на время, можно показать, что отклонение от стационарного значения стремится к нулю как $1/t$. Аналогичные колебания в одномерной цепочке затухают как $1/\sqrt{t}$.

1.8. Пример. Треугольная решетка (поперечные колебания)

Рассмотрим изменение кинетической энергии в растянутой треугольной решетке, совершающей поперечные колебания. Радиус-век-

торы частиц в недеформированном состоянии задаются соотношениями

$$\mathbf{x}_{n,m} = a(n\mathbf{e}_1 + m\mathbf{e}_2), \quad \mathbf{e}_1 = \frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{i} + \frac{1}{2}\mathbf{j}, \quad \mathbf{e}_2 = -\frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{i} + \frac{1}{2}\mathbf{j}, \quad (1.41)$$

где \mathbf{i}, \mathbf{j} — ортогональные единичные векторы; a — начальное расстояние между ближайшими соседями.

Частицы соединены с соседями линейными пружинками. Равновесная длина пружинок меньше a , т. е. решетка растянута (в нерастянутой решетке поперечные колебания являются существенно нелинейными). Тогда линеаризованные уравнения поперечных колебаний имеют вид

$$\begin{aligned} \ddot{u}(\mathbf{x}) = \omega_*^2 & \left[u(\mathbf{x} + \mathbf{a}_1) + u(\mathbf{x} + \mathbf{a}_2) + u(\mathbf{x} + \mathbf{a}_3) - 6u(\mathbf{x}) + \right. \\ & \left. + u(\mathbf{x} + \mathbf{a}_{-1}) + u(\mathbf{x} + \mathbf{a}_{-2}) + u(\mathbf{x} + \mathbf{a}_{-3}) \right]. \end{aligned} \quad (1.42)$$

Видно, что уравнение (1.42) является частным случаем уравнения (1.1), где параметры ω_* , \mathbf{a}_α , b_α определяются формулами

$$\begin{aligned} \omega_* &= \sqrt{\frac{F}{Ma}}, \quad b_{\pm 1} = b_{\pm 2} = b_{\pm 3} = 1, \quad b_0 = -6, \\ \mathbf{a}_1 &= a\mathbf{e}_1, \quad \mathbf{a}_2 = a\mathbf{e}_2, \quad \mathbf{a}_3 = \mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2, \end{aligned} \quad (1.43)$$

где F — сила натяжения; M — масса частицы. При программной реализации численного интегрирования уравнений движения удобнее пользоваться следующей индексной формой записи:

$$\begin{aligned} \ddot{u}_{n,m} = \omega_*^2 & \left(u_{n+1,m} + u_{n,m+1} + u_{n+1,m+1} - \right. \\ & \left. - 6u_{n,m} + u_{n-1,m} + u_{n,m-1} + u_{n-1,m-1} \right), \end{aligned} \quad (1.44)$$

где $u_{n,m} = u(\mathbf{x}_{n,m})$ — проекция вектора перемещения на нормаль к плоскости решетки.

Для построения дисперсионного соотношения достаточно подставить выражения (1.43) для параметров b_α и векторов \mathbf{a}_α в общую

формулу (1.8). В результате подстановки получаем:

$$\omega = 2\omega_* \sqrt{\sin^2 \frac{p_1}{2} + \sin^2 \frac{p_2}{2} + \sin^2 \frac{p_1 + p_2}{2}}, \quad (1.45)$$

$$\mathbf{k} = \frac{1}{a} (p_1 \tilde{\mathbf{e}}_1 + p_2 \tilde{\mathbf{e}}_2).$$

Дисперсионная поверхность (1.45) показана на рис. 1.3.

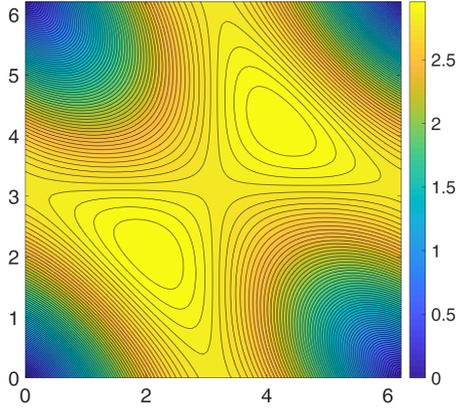


Рис. 1.3. Дисперсионная поверхность $\omega(p_1, p_2)/\omega_*$ для треугольной решетки, совершающей поперечные колебания

Начальные условия для уравнений движения частиц, соответствующие однородному начальному распределению энергии T_0 заданы формулой (1.39). В таком случае начальные кинетическая и потенциальная энергии не равны. Уравнивание энергий приводит к колебаниям кинетической энергии, описываемым формулой (1.33). Подстановка дисперсионного соотношения (1.45) в формулу (1.33) дает

$$T = \frac{T_0}{2} \left(1 + \frac{1}{\pi^2} \int_0^\pi \int_0^\pi \cos \left(4\omega_* t \sqrt{\sin^2 \frac{p_1}{2} + \sin^2 \frac{p_2}{2} + \sin^2 \frac{p_1 + p_2}{2}} \right) dp_1 dp_2 \right). \quad (1.46)$$

Для проверки формулы (1.46) проведем сравнение с результатами численного решения уравнений движения (1.44). Параметры численного моделирования будем использовать такие же, как и для

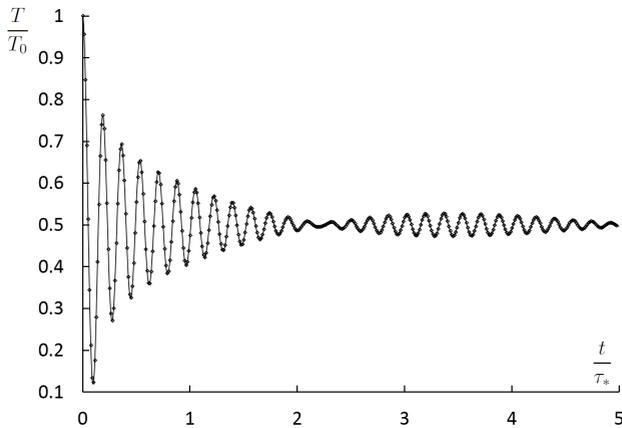


Рис. 1.4. Осцилляции кинетической энергии в треугольной решетке, совершающей поперечные колебания. Сплошная линия — аналитическое решение (1.46), ромбы — численное решение уравнений динамики решетки (1.44)

квадратной решетки, рассмотренной в предыдущем пункте. Зависимость полной кинетической энергии системы от времени показана на рис. 1.4.

Из рис. 1.4 видно, что аналитическое решение (1.46) совпадает с результатами численного решения уравнений динамики решетки (1.44). Колебания кинетической энергии имеют две характерные частоты, близкие по величине, в результате чего наблюдаются биения.

1.9. Заключительные замечания

В данной главе приведено описание переходных процессов в скалярных решетках со случайными начальными скоростями. Уравнения движения записаны в общем виде, позволяющем проводить выкладки для широкого класса систем, к которым относятся, например, одномерные цепочки простой структуры и двумерные простые решетки, совершающие поперечные колебания. При этом подход позволяет учитывать взаимодействие произвольного числа соседей. Построен общий вид дисперсионного соотношения. Исследованы колебания кинетической энергии. Выведено точное уравнение для кова-

риаций скоростей с детерминированными начальными условиями, описывающее данный процесс. Получено решение данного уравнения, описывающее колебания кинетической энергии для всего рассматриваемого класса решеток (формула (1.33)). Информация о решетке входит в данную формулу через дисперсионное соотношение.

Для примера рассмотрены три конкретные решетки: одномерная цепочка Гука, растянутая квадратная решетка, совершающая поперечные колебания, и растянутая треугольная решетка, совершающая поперечные колебания. Для цепочки Гука воспроизведены результаты работы [21]. Для квадратной решетки построена зависимость кинетической энергии от времени. Показано, что кинетическая энергия совершает колебания, связанные с уравниванием кинетической и потенциальной энергий. При этом отклонение кинетической энергии от равновесного значения совершает затухающие колебания. Амплитуда колебаний затухает обратно пропорционально времени. Колебания имеют две основные частоты, соответствующие нулевым значениям групповой скорости. Аналогичные результаты получены для треугольной решетки. Показано, что колебания кинетической энергии также имеют две основные частоты, но, в отличие от квадратной решетки, данные частоты близки по величине, что приводит к возникновению биений.

2. РЕШЕТКИ С НЕСКОЛЬКИМИ СТЕПЕНЯМИ СВОБОДЫ НА ЭЛЕМЕНТАРНУЮ ЯЧЕЙКУ

2.1. Матричная запись уравнений движения

Произведем обобщение полученных ранее результатов на случай простых и сложных кристаллических решеток в пространстве произвольной размерности. Для этого будем использовать матричную запись уравнений динамики, позволяющую проводить основные выкладки в общем виде для решетки, элементарная ячейка которой имеет N степеней свободы.

Для идентификации элементарных ячеек будем использовать радиус-векторы \mathbf{x} их центров¹. Для аналитических выкладок это удобнее, чем использование индексов². Каждая элементарная ячейка имеет степени свободы $u_i(\mathbf{x})$, $i = 1, \dots, N$, соответствующие компонентам векторов перемещений частиц, находящихся в данной ячейке. Компоненты перемещений формируют вектор-столбец

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = (u_1, u_2, \dots, u_N)^\top,$$

где \top — знак транспонирования.

Запишем уравнения динамики частиц, находящихся в элементарной ячейке с радиус-вектором \mathbf{x} , в матричном виде:

$$M\dot{\mathbf{v}}(\mathbf{x}) = \mathbf{d}_x \mathbf{u}(\mathbf{x}), \quad (2.1)$$

где $\mathbf{u}(\mathbf{x})$, $\mathbf{v}(\mathbf{x})$ — вектор-столбцы из компонент векторов перемеще-

¹Конкретное определение центра ячейки не влияет на дальнейшие рассуждения. Для определенности можно считать, например, что центр ячейки совпадает с ее центром масс в недеформированном состоянии.

²Число индексов зависит от размерности пространства, а радиус-вектор ячейки всегда один.

ний и скоростей частиц, находящихся в ячейке с радиус-вектором \mathbf{x} ; \mathbf{M} — диагональная матрица $N \times N$, составленная из масс частиц; \mathbf{d}_x — матричный разностный оператор.

Для нумерации всех ячеек, соседних с ячейкой \mathbf{x} , будем использовать индекс α . Вектор, соединяющий центр ячейки \mathbf{x} и соседней ячейки номер α , обозначим \mathbf{a}_α . При этом, как и ранее, векторы \mathbf{a}_α удовлетворяют тождеству:

$$\mathbf{a}_\alpha = -\mathbf{a}_{-\alpha}.$$

Такую нумерацию ячеек всегда можно ввести, так как элементарные ячейки сложной решетки образуют простую решетку.

Как и ранее, ограничимся рассмотрением линейных взаимодействий между частицами. При этом сила, действующая на частицы элементарной ячейки \mathbf{x} , представима в виде линейной комбинации перемещений всех частиц решетки:

$$\mathbf{d}_x \mathbf{u}(\mathbf{x}) = \sum_{\alpha} \mathbf{C}_\alpha \mathbf{u}(\mathbf{x} + \mathbf{a}_\alpha), \quad \mathbf{C}_\alpha = \mathbf{C}_{-\alpha}^\top, \quad (2.2)$$

где \mathbf{C}_α — динамическая матрица, коэффициенты которой определяют вклад ячейки α в суммарную силу, действующую на рассматриваемую ячейку. Суммирование ведется по всем соседним элементарным ячейкам α . Похожая форма используется в работе [34], где также вводится условие $\mathbf{C}_\alpha = \mathbf{C}_{-\alpha}^\top$. Далее будет показано, что при выполнении данного условия динамическая матрица, собственные числа которой дают дисперсионное соотношение, является эрмитовой (см. п.2.2).

Начальные условия, как и ранее, будут рассматриваться следующие:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = 0, \quad \mathbf{v}(\mathbf{x}) = \mathbf{v}_0(\mathbf{x}), \quad (2.3)$$

где $\mathbf{v}_0(\mathbf{x})$ — независимые случайные векторы с нулевым математическим ожиданием. Система уравнений движения (2.1) с начальными условиями (2.3) полностью определяют динамику кристалла в любой момент времени.

При начальных условиях (2.3) полная энергия равна начальной кинетической энергии. Потенциальная энергия в начальный момент времени равна нулю. Кроме того, начальная кинетическая энергия может быть, вообще говоря, неравномерно распределена по степеням свободы элементарной ячейки. Движение частиц приводит к уравни-

ванию кинетической и потенциальной энергий и перераспределению энергии по степеням свободы элементарной ячейки. Далее приводится аналитическое описание данных переходных процессов в сложных решетках.

2.2. Некоторые свойства эрмитовых матриц

Поскольку далее свойства эрмитовых матриц, их собственных векторов и собственных чисел будут активно использоваться при описании переходных процессов в сложных решетках, кратко перечислим свойства таких матриц.

Комплексная матрица Ω называется эрмитовой, если она удовлетворяет соотношению

$$\Omega = \Omega^{*\top}, \quad (2.4)$$

где $*$ — знак комплексного сопряжения; \top — знак транспонирования.

Эрмитовы матрицы обладают следующими свойствами. Пусть λ_j — собственное число матрицы Ω , соответствующее правому собственному вектору \mathbf{p}_j :

$$\Omega \mathbf{p}_j = \lambda_j \mathbf{p}_j. \quad (2.5)$$

Все собственные числа эрмитовой матрицы вещественны. Отсюда следует, что вектор $\mathbf{p}_j^{*\top}$ является левым собственным вектором матрицы Ω . Действительно, транспонируя обе части (2.5) и делая операцию комплексного сопряжения, получим:

$$(\Omega \mathbf{p}_j)^{*\top} = \mathbf{p}_j^{*\top} \Omega^{*\top} = \mathbf{p}_j^{*\top} \Omega = \lambda_j \mathbf{p}_j.$$

Здесь использованы формула (2.4) и вещественность собственных чисел.

Далее будет показано, что квадраты собственных частот решетки являются собственными числами динамической матрицы, которая является эрмитовой. Для устойчивости решетки необходимо, чтобы собственные частоты были вещественными, а их квадраты — положительными. Следовательно, динамическая матрица должна быть не только эрмитовой, но и положительно определенной.

Собственные векторы эрмитовой матрицы, соответствующие различным собственным числам, ортогональны. Ограничимся случаем, когда все собственные числа различны. Тогда для нормированных

собственных векторов выполняется тождество

$$\mathbf{p}_i^{*\top} \mathbf{p}_j = \mathbf{p}_i^\top \mathbf{p}_j^* = \delta_{ij}.$$

Эрмитова матрица может быть представлена в виде

$$\mathbf{\Omega} = \mathbf{P} \mathbf{\Lambda} \mathbf{P}^{*\top},$$

где $\mathbf{P} = \{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_N\}$ — матрица, столбцы которой являются собственными векторами $\mathbf{\Omega}$; $\mathbf{\Lambda}$ — диагональная матрица, составленная из собственных чисел $\mathbf{\Omega}$. Число собственных векторов равно размерности пространства, и они ортогональны (значит, линейно независимы). Следовательно, их можно использовать в качестве базиса. Матрица \mathbf{P} является унитарной, т. е. обладает свойством:

$$\mathbf{P}^{*\top} \mathbf{P} = \mathbf{P} \mathbf{P}^{*\top} = \mathbf{E}.$$

Также далее будет использоваться тождество, справедливое для любой квадратной матрицы \mathbf{A} :

$$\text{tr}(\mathbf{P} \mathbf{A} \mathbf{P}^{*\top}) = \text{tr} \mathbf{A}.$$

Перечисляемые в данном пункте свойства эрмитовых матриц далее используются, в частности, для решения уравнений движения сложных решеток.

2.3. Дисперсионное соотношение

Построим дисперсионное соотношение для решеток, описываемых уравнением (2.1). Как было показано в главе 1, данное соотношение играет ключевую роль и при описании переходных процессов в решетках.

Рассмотрим уравнения динамики решетки (2.1). Сделаем подстановку:

$$\mathbf{M}^{\frac{1}{2}} \mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{A} e^{i(\omega t + \mathbf{k} \cdot \mathbf{x})}, \quad (2.6)$$

где $\mathbf{M}^{\frac{1}{2}} \mathbf{M}^{\frac{1}{2}} = \mathbf{M}$. Иными словами, будем искать решение в виде гармонической волны с частотой ω и волновым вектором \mathbf{k} . Под-

ставляя (2.6) в уравнение динамики (2.1), получим:

$$\left(\sum_{\alpha} M^{-\frac{1}{2}} C_{\alpha} M^{-\frac{1}{2}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_{\alpha}} + \omega^2 \mathbf{E} \right) \mathbf{A} = 0. \quad (2.7)$$

Выражение (2.7) представляет собой однородную систему линейных уравнений относительно \mathbf{A} . Система имеет нетривиальное решение при выполнении условия

$$\det \left(\sum_{\alpha} M^{-\frac{1}{2}} C_{\alpha} M^{-\frac{1}{2}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_{\alpha}} + \omega^2 \mathbf{E} \right) = 0. \quad (2.8)$$

Формула (2.8) — уравнение степени N относительно ω^2 . Решение данного уравнения дает дисперсионное соотношение $\omega^2(\mathbf{k})$. Иными словами, квадраты частот, ω^2 , являются собственными числами динамической матрицы:

$$\boldsymbol{\Omega} = - \sum_{\alpha} M^{-\frac{1}{2}} C_{\alpha} M^{-\frac{1}{2}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_{\alpha}}. \quad (2.9)$$

Покажем, что матрица $\boldsymbol{\Omega}$ — эрмитова при выполнении введенного выше условия $C_{\alpha} = C_{-\alpha}^{\top}$:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\Omega}^{\top*} &= - \sum_{\alpha} M^{-\frac{1}{2}} C_{\alpha}^{\top} M^{-\frac{1}{2}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_{\alpha}} = \\ &= - \sum_{\alpha} M^{-\frac{1}{2}} C_{-\alpha}^{\top} M^{-\frac{1}{2}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_{-\alpha}} = \\ &= - \sum_{\alpha} M^{-\frac{1}{2}} C_{\alpha} M^{-\frac{1}{2}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_{\alpha}} = \boldsymbol{\Omega}, \end{aligned}$$

что и требовалось доказать.

Покажем теперь, что дисперсионное соотношение четно по отношению к волновому вектору. Физически это означает, что волны одной длины, распространяющиеся в противоположных направлениях, имеют одинаковые частоты:

$$\omega^2(-\mathbf{k}) = \omega^2(\mathbf{k}). \quad (2.10)$$

Для доказательства перепишем формулу (2.8):

$$\begin{aligned}
& \det (\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k}) + \omega^2(\mathbf{k})\mathbf{E}) = \\
& = \det \left(\sum_{\alpha} M^{-\frac{1}{2}} C_{\alpha}^{\top} M^{-\frac{1}{2}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_{\alpha}} + \omega^2 \mathbf{E} \right) = \\
& = \det \left(\sum_{\alpha} M^{-\frac{1}{2}} C_{-\alpha}^{\top} M^{-\frac{1}{2}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_{-\alpha}} + \omega^2 \mathbf{E} \right) = \\
& = \det \left(\sum_{\alpha} M^{-\frac{1}{2}} C_{\alpha} M^{-\frac{1}{2}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_{\alpha}} + \omega^2(\mathbf{k})\mathbf{E} \right) = \\
& = \det (\boldsymbol{\Omega}(-\mathbf{k}) + \omega^2(\mathbf{k})\mathbf{E}) .
\end{aligned}$$

Здесь использована вторая из формул (2.2) и тождество $\det \mathbf{A} = \det \mathbf{A}^{\top}$. Видно, что матрицы $\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})$ и $\boldsymbol{\Omega}(-\mathbf{k})$ имеют одинаковые собственные числа, следовательно, выполняется формула (2.10).

Динамическая матрица обладает следующим важным свойством, которое сразу следует из определения

$$\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k}) = \boldsymbol{\Omega}(-\mathbf{k})^* . \quad (2.11)$$

Покажем, что собственные векторы \mathbf{p} динамической матрицы обладают свойством

$$\mathbf{p}(\mathbf{k}) = \mathbf{p}(-\mathbf{k})^* . \quad (2.12)$$

По определению собственные векторы такие, что

$$\begin{aligned}
& \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})\mathbf{p}(\mathbf{k}) = \omega^2(\mathbf{k})\mathbf{p}(\mathbf{k}) \Rightarrow \\
& \Rightarrow \boldsymbol{\Omega}(-\mathbf{k})\mathbf{p}(-\mathbf{k}) = \omega^2(-\mathbf{k})\mathbf{p}(-\mathbf{k}) \Rightarrow \\
& \Rightarrow \boldsymbol{\Omega}(-\mathbf{k})^*\mathbf{p}(-\mathbf{k})^* = \omega^2(-\mathbf{k})\mathbf{p}(-\mathbf{k})^* \Rightarrow \\
& \Rightarrow \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})\mathbf{p}(-\mathbf{k})^* = \omega^2(\mathbf{k})\mathbf{p}(-\mathbf{k})^* .
\end{aligned}$$

Здесь использованы свойства (2.10) и (2.11). Из последнего равенства следует, что $\mathbf{p}(-\mathbf{k})^*$ — собственный вектор матрицы $\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})$, соответствующий собственному числу $\omega^2(\mathbf{k})$. Следовательно, векторы $\mathbf{p}(\mathbf{k})$ и $\mathbf{p}(-\mathbf{k})^*$ коллинеарны. Если потребовать, чтобы собственные векторы были единичными, то получим (2.12).

Таким образом, построение дисперсионного соотношения сводится к отысканию собственных чисел динамической матрицы Ω , определенной формулой (2.9). Данная матрица имеет размерность, равную числу степеней свободы элементарной ячейки, и является эрмитовой. Дисперсионное соотношение симметрично относительно смены знака волнового вектора.

2.4. Уравнение динамики ковариаций

В силу случайности рассматриваемых начальных условий (2.3) скорости частиц в любой момент времени также являются случайными. В настоящем пособии основное внимание уделяется не самим случайным величинам, а их статистическим характеристикам. В частности, рассматривается математическое ожидание кинетической энергии, которое может трактоваться как величина, пропорциональная кинетической температуре. Для того чтобы ввести статистические характеристики, рассматривается бесконечное множество реализаций случайных начальных условий (2.3).

В гармонических кристаллах кинетические энергии (температуры), соответствующие разным степеням свободы, вообще говоря, различны [9, 46]. Поэтому, для того чтобы охарактеризовать распределение энергии по степеням свободы элементарной ячейки, вводится матрица \mathbf{T} размерности $N \times N$:

$$\mathbf{T}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{M}^{\frac{1}{2}} \langle \mathbf{v}(\mathbf{x}) \mathbf{v}(\mathbf{x})^{\top} \rangle \mathbf{M}^{\frac{1}{2}} \Leftrightarrow T_{ij} = \frac{1}{2} \sqrt{M_i M_j} \langle v_i v_j \rangle, \quad (2.13)$$

где M_i — элемент ii матрицы \mathbf{M} , равный массе, соответствующей степени свободы i элементарной ячейки. Диагональный элемент T_{ii} далее называется кинетической энергией, соответствующей степени свободы номер i элементарной ячейки. Внедиагональный элемент T_{ij} характеризует корреляцию между компонентами i и j столбца скоростей $\mathbf{v}(\mathbf{x})$.

Также используется кинетическая энергия элементарной ячейки T :

$$T(\mathbf{x}) = \frac{1}{N} \text{tr} \mathbf{T}(\mathbf{x}), \quad (2.14)$$

где N — число степеней свободы элементарной ячейки, $\text{tr}(\dots)$ — след (сумма диагональных элементов) матрицы. В случае если кинетиче-

ская энергия равномерно распределена по степеням свободы элементарной ячейки, все кинетические энергии T_{ii} равны T .

Далее выводится уравнение, описывающее динамику обобщенной кинетической энергии \mathbf{K} , определяемой формулой

$$\begin{aligned}\mathbf{K}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) &= \frac{1}{2} M^{\frac{1}{2}} \left\langle \mathbf{v}(\mathbf{x}) \mathbf{v}(\mathbf{y})^\top \right\rangle M^{\frac{1}{2}}, \\ \mathbf{Z} &= \frac{1}{2} M^{\frac{1}{2}} \left\langle \ddot{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) \ddot{\mathbf{u}}(\mathbf{y})^\top \right\rangle M^{\frac{1}{2}}.\end{aligned}\tag{2.15}$$

Заметим, что обобщенная кинетическая энергия связана с матрицей \mathbf{T} соотношением

$$\mathbf{T} = \mathbf{K}(\mathbf{x}, \mathbf{x}).$$

Дифференцируя величины (2.15) по времени с учетом уравнения движения (2.1), получим:

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{K}} &= D_x \mathbf{K} + \mathbf{K} D_y^\top + 2\mathbf{Z}, \\ \dot{\mathbf{Z}} &= D_x \mathbf{Z} + \mathbf{Z} D_y^\top + 2D_x \mathbf{K} D_y^\top, \\ D_x \mathbf{K} &= \sum_{\alpha} M^{-\frac{1}{2}} C_{\alpha} M^{-\frac{1}{2}} \mathbf{K}(\mathbf{x} + \mathbf{a}_{\alpha}, \mathbf{y}), \\ \mathbf{K} D_y^\top &= \sum_{\alpha} \mathbf{K}(\mathbf{x}, \mathbf{y} + \mathbf{a}_{\alpha}) M^{-\frac{1}{2}} C_{\alpha}^\top M^{-\frac{1}{2}}.\end{aligned}\tag{2.16}$$

Исключая \mathbf{Z} из данной системы уравнений, получим:

$$\ddot{\mathbf{K}} - 2 \left(D_x \ddot{\mathbf{K}} + \ddot{\mathbf{K}} D_y^\top \right) + D_x^2 \mathbf{K} - 2D_x \mathbf{K} D_y^\top + \mathbf{K} \left(D_y^\top \right)^2 = 0, \tag{2.17}$$

где $D_x^2 = D_x D_x$. Формула (2.17) описывает как перераспределение энергии по степеням свободы ячейки, так и перенос энергии в сложных решетках со случайными начальными скоростями. Далее ограничимся только рассмотрением колебаний энергий в решетках с однородным начальным распределением энергии (температуры).

Представим обобщенную кинетическую энергию в виде функции пространственной координаты $\mathbf{r} = \frac{1}{2}(\mathbf{x} + \mathbf{y})$ и ковариационной координаты $\mathbf{x} - \mathbf{y}$:

$$\mathbf{K}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \mathbf{K} \left(\frac{\mathbf{x} + \mathbf{y}}{2}, \mathbf{x} - \mathbf{y} \right).$$

В случае однородного распределения начальной энергии по пространству функция \mathbf{K} не зависит от \mathbf{r} . Тогда справедливы соотношения

$$\begin{aligned} D_x \mathbf{K} &= \sum_{\alpha} M^{-\frac{1}{2}} C_{\alpha} M^{-\frac{1}{2}} \mathbf{K}(\mathbf{x} - \mathbf{y} + \mathbf{a}_{\alpha}) = D\mathbf{K}, \\ \mathbf{K} D_y^{\top} &= \sum_{\alpha} \mathbf{K}(\mathbf{x} - \mathbf{y} - \mathbf{a}_{\alpha}) M^{-\frac{1}{2}} C_{\alpha}^{\top} M^{-\frac{1}{2}} = \\ &= \sum_{\alpha} \mathbf{K}(\mathbf{x} - \mathbf{y} + \mathbf{a}_{\alpha}) M^{-\frac{1}{2}} C_{\alpha} M^{-\frac{1}{2}} = \mathbf{K} D. \end{aligned} \quad (2.18)$$

Здесь при выводе использовано тождество $C_{\alpha} = C_{-\alpha}^{\top}$. В результате получаем следующие формулы для операторов:

$$D_x = D_y^{\top} = D. \quad (2.19)$$

Подставляя выражения для операторов (2.19) в уравнение (2.17), получим:

$$\ddot{\ddot{\mathbf{K}}} - 2(D\ddot{\mathbf{K}} + \ddot{\mathbf{K}}D) + D^2\mathbf{K} - 2D\mathbf{K}D + \mathbf{K}D^2 = 0. \quad (2.20)$$

Здесь $D^2\mathbf{K} = D(D\mathbf{K})$. Начальные условия для \mathbf{K} , соответствующие начальным условиям (2.3), имеют вид

$$\begin{aligned} \mathbf{K} &= \mathbf{K}_0 = T_0 \delta_D(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad \dot{\mathbf{K}} = 0, \\ \ddot{\mathbf{K}} &= D\mathbf{K}_0 + \mathbf{K}_0 D, \quad \ddot{\ddot{\mathbf{K}}} = 0, \end{aligned} \quad (2.21)$$

где $\delta_D(0) = 1$; $\delta_D(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = 0$ при $\mathbf{x} \neq \mathbf{y}$.

Уравнение (2.20) с начальными условиями (2.21) описывает динамику обобщенных кинетических энергий в случае однородного начального распределения энергии. Решение данного уравнения приведено в следующем пункте.

2.5. Колебания кинетических энергий

Построим точное аналитическое решение уравнения (2.20) с начальными условиями (2.21). Решение описывает, в частности, поведение кинетических энергий, соответствующих степеням свободы элементарной ячейки.

Решение получается с использованием дискретного преобразования Фурье по переменной $\mathbf{x} - \mathbf{y}$. Векторы $\mathbf{x} - \mathbf{y}$ образуют ту же решетку, что и векторы \mathbf{x} , поэтому справедливо, что

$$\mathbf{x} - \mathbf{y} = \sum_{j=1}^d z_j \mathbf{e}_j,$$

где \mathbf{e}_j , $j = 1, \dots, d$ — базисные векторы решетки; z_j — целые числа; d — размерность пространства.

Применяя дискретное преобразование Фурье (1.11) в формулах (2.20) и (2.21), получим уравнение

$$\begin{aligned} \overset{\dots}{\hat{K}} + 2 \left(\Omega \overset{\ddot{K}}{\hat{K}} + \overset{\ddot{K}}{\hat{K}} \Omega \right) + \Omega^2 \overset{\hat{K}}{\hat{K}} - 2\Omega \overset{\hat{K}}{\hat{K}} \Omega + \overset{\hat{K}}{\hat{K}} \Omega^2 = 0, \\ \Omega(\mathbf{k}) = - \sum_{\alpha} M^{-\frac{1}{2}} C_{\alpha} M^{-\frac{1}{2}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_{\alpha}}, \end{aligned} \quad (2.22)$$

с начальными условиями

$$\overset{\hat{K}}{\hat{K}} = \frac{1}{2} T_0, \quad \overset{\dot{K}}{\hat{K}} = 0, \quad \overset{\ddot{K}}{\hat{K}} = -\frac{1}{2} (\Omega T_0 + T_0 \Omega), \quad \overset{\dots}{\hat{K}} = 0. \quad (2.23)$$

Здесь использованы тождества

$$\Phi(\mathbf{K}(\mathbf{x} - \mathbf{y} + \mathbf{a}_{\alpha})) = \overset{\hat{K}}{\hat{K}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_{\alpha}}, \quad \Phi(\delta_D(\mathbf{x} - \mathbf{y})) = 1,$$

$$\Phi(D\mathbf{K}) = -\Omega \overset{\hat{K}}{\hat{K}}, \quad \Phi(D^2\mathbf{K}) = -\Omega \Phi(D\mathbf{K}) = \Omega^2 \overset{\hat{K}}{\hat{K}},$$

где $\overset{\hat{K}}{\hat{K}}$ — Фурье-образ \mathbf{K} ; $i^2 = -1$; $\mathbf{k} = \sum_{j=1}^d p_j \tilde{\mathbf{e}}_j$ — волновой вектор; $\tilde{\mathbf{e}}_j$ — векторы сопряженного базиса, т. е. $\tilde{\mathbf{e}}_j \cdot \mathbf{e}_k = \delta_{jk}$; $p_j \in [0; 2\pi]$.

Матрица Ω в формуле (2.22) совпадает с введенной ранее динамической матрицей решетки. Для упрощения уравнения (2.22) воспользуемся тем, что матрица Ω — эрмитова. Поэтому она представляется в виде

$$\Omega = P \Lambda P^{*\top}, \quad \Lambda_{ij} = \omega_j^2 \delta_{ij}, \quad (2.24)$$

где ω_j^2 , $j = 1, \dots, N$ — собственные числа матрицы Ω , $\omega_j(\mathbf{k})$ — ветки дисперсионного соотношения решетки (ниже рассматриваются только положительные частоты $\omega_j(\mathbf{k}) \geq 0$); матрица P составлена из нормированных собственных векторов матрицы Ω , которые часто

называют векторами поляризации [59].

Подставим представление (2.24) в уравнение (2.22) и умножим обе части слева на $\mathbf{P}^{*\top}$ и справа на \mathbf{P} . В результате получим дифференциальное уравнение для матрицы $\mathbf{K}' = \mathbf{P}^{*\top} \dot{\mathbf{K}} \mathbf{P}$

$$\begin{aligned} \ddot{\mathbf{K}}' + 2 \left(\Lambda \ddot{\mathbf{K}}' + \ddot{\mathbf{K}}' \Lambda \right) + \Lambda^2 \mathbf{K}' - 2\Lambda \mathbf{K}' \Lambda + \mathbf{K}' \Lambda^2 = 0 &\Leftrightarrow \\ \Leftrightarrow \ddot{K}'_{ij} + 2(\omega_i^2 + \omega_j^2) \dot{K}'_{ij} + (\omega_i^2 - \omega_j^2)^2 K'_{ij} = 0. \end{aligned} \quad (2.25)$$

Аналогичные преобразования в формуле (2.23) дают начальные условия для \mathbf{K}' . Решая уравнения (2.25) с начальными условиями, используя связь матриц \mathbf{T} и \mathbf{K} и применяя обратное дискретное преобразование Фурье, получим

$$\begin{aligned} \mathbf{T} &= \int_{\mathbf{k}} \mathbf{P} \mathbf{T}' \mathbf{P}^{*\top} d\mathbf{k}, \\ T'_{ij} &= \frac{1}{2} \{ \mathbf{P}^{*\top} \mathbf{T}_0 \mathbf{P} \}_{ij} [\cos((\omega_i - \omega_j)t) + \cos((\omega_i + \omega_j)t)]. \end{aligned} \quad (2.26)$$

Здесь $\{\dots\}_{ij}$ — элемент матрицы с индексами i, j ; $\omega_i(\mathbf{k}) \geq 0, i = 1, \dots, N$. Интегрирование ведется по безразмерным компонентам волнового вектора \mathbf{k} . Формула (2.26) определяет изменение во времени кинетических энергий, соответствующих степеням свободы элементарной ячейки.

В случае, если начальная кинетическая энергия равно распределена по степеням свободы элементарной ячейки $\mathbf{T}_0 = T_0 \mathbf{E}$, формула (2.26) принимает вид

$$\mathbf{T} = \frac{T_0}{2} \left(\mathbf{E} + \int_{\mathbf{k}} \mathbf{P} \mathbf{B}(t) \mathbf{P}^{*\top} d\mathbf{k} \right), \quad B_{ij} = \cos(2\omega_j t) \delta_{ij}, \quad (2.27)$$

где \mathbf{E} — единичная матрица. Формула (2.27) показывает, что при переходе к равновесию матрица \mathbf{T} , вообще говоря, не шаровая. Иными словами, энергии, соответствующие степеням свободы элементарной ячейки, отличаются, даже если их начальные значения равны. В общем случае матрица \mathbf{P} является комплексной. Следовательно, матрицы $\mathbf{P}^{*\top} \mathbf{T}_0 \mathbf{P}$ и $\mathbf{P} \mathbf{B} \mathbf{P}^{*\top}$ в формулах (2.26), (2.27) тоже комплексные. Однако результирующая матрица \mathbf{T} — вещественная. Данный

факт можно доказать, используя следующие свойства:

$$\mathbf{P}(\mathbf{k}) = \mathbf{P}(-\mathbf{k})^*, \quad \omega_j^2(\mathbf{k}) = \omega_j^2(-\mathbf{k}).$$

Далее с использованием формулы (2.26) исследуется поведение кинетической энергии элементарной ячейки T (см. формулы (2.13), (2.14)). Математическое ожидание полной механической энергии ячейки сохраняется, поэтому изменение кинетической энергии вызвано перераспределением энергии между кинетической и потенциальной.

Кинетическая энергия вычисляется с использованием формулы (2.26) и тождества $\text{tr}(\mathbf{P}\mathbf{T}'\mathbf{P}^{*\top}) = \text{tr}\mathbf{T}'$:

$$T = \frac{T_0}{2} \left[1 + \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \int_{\mathbf{k}} \left(1 + \frac{\{\mathbf{P}^{*\top} \text{dev}\mathbf{T}_0 \mathbf{P}\}_{jj}}{T_0} \right) \cos(2\omega_j(\mathbf{k})t) d\mathbf{k} \right], \quad (2.28)$$

где $\text{dev}\mathbf{T}_0 = \mathbf{T}_0 - T_0\mathbf{E}$, $T_0 = \frac{1}{N}\text{tr}\mathbf{T}_0$. Формула (2.28) показывает, что на поведение полной кинетической энергии T влияет ее начальное распределение по степеням свободы ячейки. Соответствующий пример приведен ниже (см. п. 2.8).

В случае равного распределения начальной кинетической энергии по степеням свободы ($\text{dev}\mathbf{T}_0 = 0$) формула (2.28) принимает вид

$$T = \frac{T_0}{2} \left[1 + \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \int_{\mathbf{k}} \cos(2\omega_j(\mathbf{k})t) d\mathbf{k} \right]. \quad (2.29)$$

Данное выражение также можно получить, вычисляя след в формуле (2.27).

Формула (2.29) справедлива для решеток с произвольным числом степеней свободы элементарной ячейки. Она обобщает результаты, полученные в работах [21, 23, 24, 35] для нескольких одномерных и двумерных простых решеток. В случае скалярных решеток ($N = 1$), формула (2.29) совпадает с выражением (1.33), полученным в первой главе.

Подынтегральные выражения в формулах (2.28), (2.29) — быстро осциллирующие знакопеременные функции. Интегралы такого типа, как правило, стремятся к нулю при стремлении большого параметра (времени) к бесконечности [60]. Следовательно, кинетическая энергия стремится к $\frac{T_0}{2}$. Уменьшение кинетической энергии связано

с переходом части энергии в потенциальную. Отметим, что данный переход в бесконечных кристаллах происходит необратимо. Необратимость связана, по-видимому, с уходом всех возмущений в уравнении для ковариаций (2.20) на бесконечность.

Формулы (2.26), (2.28), (2.29) можно обобщить на случай конечного кристалла при периодических граничных условиях. В таком случае интегралы, соответствующие обратному преобразованию Фурье, заменяются на суммы. При этом возникают новые интересные эффекты, например, тепловое эхо [56].

Таким образом, изменение матрицы \mathbf{T} при переходе к равновесию точно описывается формулой (2.26). Переход сопровождается двумя процессами: уравниванием кинетической и потенциальной энергий (формулы (2.28), (2.29)) и перераспределением энергии по степеням свободы элементарной ячейки. С математической точки зрения первый процесс связан с изменением $\text{tr}\mathbf{T}$, а второй — с изменением $\text{dev}\mathbf{T}$.

2.6. Дополнительные законы сохранения

Покажем, что в гармонических кристаллах выполняется ряд дополнительных законов сохранения. Наличие дополнительных законов связано, по-видимому, с тем, что в гармонических кристаллах сохраняется не только полная энергия, но и энергии всех собственных форм. Данные законы позволяют, в частности, определить связь между начальными условиями и распределением энергии по степеням свободы на больших временах.

Введем обобщенный гамильтониан \mathbf{H} и лагранжиан \mathbf{L} [24]:

$$\begin{aligned} \mathbf{H} &= \mathbf{K} + \mathbf{\Pi}, & \mathbf{L} &= \mathbf{K} - \mathbf{\Pi}, & \mathbf{\Pi} &= -\frac{1}{4} (\mathbf{D}_x \mathbf{U} + \mathbf{U} \mathbf{D}_y^T), \\ \mathbf{U} &= \mathbf{M}^{\frac{1}{2}} \langle \mathbf{u}(\mathbf{x}) \mathbf{u}(\mathbf{y})^T \rangle \mathbf{M}^{\frac{1}{2}}, \end{aligned} \quad (2.30)$$

где операторы \mathbf{D}_x , \mathbf{D}_y^T определены (2.19). Дифференцируя \mathbf{K} и \mathbf{U} , получим следующую систему уравнений:

$$\ddot{\mathbf{K}} = \mathbf{D}_x \mathbf{K} + \mathbf{K} \mathbf{D}_y^T + \mathbf{D}_x \mathbf{U} \mathbf{D}_y^T, \quad \ddot{\mathbf{U}} = \mathbf{D}_x \mathbf{U} + \mathbf{U} \mathbf{D}_y^T + 4\mathbf{K}. \quad (2.31)$$

Исключая \mathbf{K} из данной системы, получим

$$\ddot{\mathbf{U}} - 2 \left(\mathbf{D}_x \ddot{\mathbf{U}} + \ddot{\mathbf{U}} \mathbf{D}_y^\top \right) + \mathbf{D}_x^2 \mathbf{U} - 2 \mathbf{D}_x \mathbf{U} \mathbf{D}_y^\top + \mathbf{U} \left(\mathbf{D}_y^\top \right)^2 = 0. \quad (2.32)$$

Следовательно, \mathbf{U} удовлетворяет тому же уравнению, что и \mathbf{K} (см. формулу (2.17)).

Вычислим производную по времени от обобщенного гамильтониана:

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{H}} &= \frac{1}{4} \left(\mathbf{D}_x \mathbf{W} - \mathbf{W} \mathbf{D}_y^\top \right), \\ \mathbf{W} &= \mathbf{M}^{\frac{1}{2}} \left\langle \mathbf{u}(\mathbf{x}) \mathbf{v}(\mathbf{y})^\top - \mathbf{v}(\mathbf{x}) \mathbf{u}(\mathbf{y})^\top \right\rangle \mathbf{M}^{\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (2.33)$$

В случае однородных начальных условий выполняется

$$\mathbf{W} = \mathbf{W}(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad \mathbf{D}_x \mathbf{W} = \mathbf{D} \mathbf{W}, \quad \mathbf{W} \mathbf{D}_y^\top = \mathbf{W} \mathbf{D},$$

тогда

$$\dot{\mathbf{H}} = \frac{1}{4} (\mathbf{D} \mathbf{W} - \mathbf{W} \mathbf{D}). \quad (2.34)$$

Домножая уравнение (2.34) на \mathbf{D}^n , вычисляя след и используя тождество $\text{tr}(\mathbf{A}\mathbf{B}) = \text{tr}(\mathbf{B}\mathbf{A})$, получим следующие законы сохранения:

$$\text{tr}(\mathbf{D}^n \mathbf{H}) = \text{tr}(\mathbf{D}^n \mathbf{H}_0), \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (2.35)$$

где \mathbf{H}_0 — начальное значение обобщенного гамильтониана. Для $n = 0$ и $\mathbf{x} = \mathbf{y}$ формула (2.35) соответствует обычному закону сохранения энергии. Формула (2.35) также может быть переписана для следа и девиатора обобщенного гамильтониана:

$$\text{tr} \mathbf{H} = \text{tr} \mathbf{H}_0, \quad \text{tr}(\mathbf{D}^n \text{dev} \mathbf{H}) = \text{tr}(\mathbf{D}^n \text{dev} \mathbf{H}_0), \quad n = 1, 2, \dots \quad (2.36)$$

Далее полученные законы сохранения (2.36) используются для вычисления равновесных (стационарных) значений кинетических энергий.

2.7. Равновесные значения кинетических энергий

Найдем стационарное состояние системы, в котором вторые производные от ковариаций скоростей и перемещений равны нулю. При этом обобщенный лагранжиан, определяемый формулой (2.30), также

обращается в нуль в силу соотношения

$$\mathbf{L} = \frac{1}{4} \dot{\mathbf{U}}.$$

Следовательно, в стационарном состоянии

$$\mathbf{K}_{eq} = \mathbf{\Pi}_{eq} = \frac{1}{2} \mathbf{H}_{eq}. \quad (2.37)$$

В силу закона сохранения энергии шаровые части обобщенных кинетической и потенциальной энергий вычисляются на основе начальных условий:

$$\text{tr} \mathbf{K}_{eq} = \text{tr} \mathbf{\Pi}_{eq} = \frac{1}{2} \text{tr} \mathbf{H}_0,$$

где \mathbf{H}_0 — начальное значение обобщенного гамильтониана.

Остается определить значения девиаторов обобщенных энергий. Обобщенный гамильтониан удовлетворяет тому же уравнению четвертого порядка (2.20), что и \mathbf{K} . В данном уравнении положим равными нулю все слагаемые, содержащие производные по времени. Также воспользуемся законами сохранения (2.35), которые можно переписать для $\text{dev} \mathbf{H}$. В результате получим замкнутую систему алгебраических уравнений для определения $\text{dev} \mathbf{H}$:

$$\mathbf{D}^2 \text{dev} \mathbf{H} - 2 \mathbf{D} \text{dev} \mathbf{H} \mathbf{D} + \text{dev} \mathbf{H} \mathbf{D}^2 = 0, \quad (2.38)$$

$$\text{tr} (\mathbf{D}^n \text{dev} \mathbf{H}) = \text{tr} (\mathbf{D}^n \text{dev} \mathbf{H}_0).$$

В частном случае кристаллов с простой решеткой данная система получена в работе [24].

Решим систему уравнений (2.38). Применим к ней дискретное преобразование Фурье и воспользуемся представлением (2.24) для матрицы $\mathbf{\Omega}$. Тогда система уравнений (2.38) примет вид

$$\mathbf{\Lambda}^2 \mathbf{H}' - 2 \mathbf{\Lambda} \mathbf{H}' \mathbf{\Lambda} + \mathbf{H}' \mathbf{\Lambda}^2 = 0,$$

$$\text{tr} (\mathbf{\Lambda}^n \mathbf{H}') = \text{tr} (\mathbf{\Omega}^n \text{dev} \hat{\mathbf{H}}_0), \quad (2.39)$$

$$\mathbf{H}' = \mathbf{P}^{*\top} \text{dev} \hat{\mathbf{H}} \mathbf{P}.$$

Покажем, что из первого уравнения следует, что матрица \mathbf{H}' — диа-

гональная. Перепишем первое из уравнений (2.39) в виде

$$\{\Lambda^2 \mathbf{H}' - 2\Lambda \mathbf{H}' \Lambda + \mathbf{H}' \Lambda^2\}_{ij} = (\omega_i^2 - \omega_j^2)^2 H'_{ij} = 0.$$

Отсюда следует, что $H'_{ij} = 0$ для всех $i \neq j$. Иными словами, матрица \mathbf{H}' — диагональная. Тогда будем искать решение системы (2.39) в виде

$$\mathbf{H}' = \text{diag} (H'_{jj}), \quad \text{tr} \mathbf{H}' = 0. \quad (2.40)$$

Подстановка (2.40) во второе из уравнений (2.39) дает

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^N \omega_j^2 H'_{jj} &= \text{tr} (\Omega \text{dev} \hat{\mathbf{H}}_0), \\ &\dots \\ \sum_{j=1}^N \omega_j^{2n} H'_{jj} &= \text{tr} (\Omega^n \text{dev} \hat{\mathbf{H}}_0). \end{aligned} \quad (2.41)$$

Правую часть можно представить в виде

$$\text{tr} (\Omega^n \text{dev} \hat{\mathbf{H}}_0) = \sum_{j=1}^N \omega_j^{2n} \{ \mathbf{P}^{*\top} \text{dev} \hat{\mathbf{H}}_0 \mathbf{P} \}_{jj}.$$

С учетом данной формулы легко угадать решение системы уравнений (2.41):

$$\mathbf{H}' = \text{diag} (\mathbf{P}^{*\top} \text{dev} \hat{\mathbf{H}}_0 \mathbf{P}).$$

Тогда, используя определение матрицы \mathbf{H}' , получим

$$\text{dev} \hat{\mathbf{H}} = \mathbf{P} \text{diag} (\mathbf{P}^{*\top} \text{dev} \hat{\mathbf{H}}_0 \mathbf{P}) \mathbf{P}^{*\top}.$$

Применяя обратное дискретное преобразование Фурье и используя связь обобщенного гамильтониана с обобщенной кинетической энергией в стационарном состоянии (2.37), получим

$$\begin{aligned} \text{tr} \mathbf{K}_{eq} &= \frac{1}{2} \text{tr} \mathbf{H}_0, \\ \text{dev} \mathbf{K}_{eq} &= \frac{1}{2} \int_{\mathbf{k}} \mathbf{P} \text{diag} (\mathbf{P}^{*\top} \text{dev} \hat{\mathbf{H}}_0 \mathbf{P}) \mathbf{P}^{*\top} d\mathbf{k}. \end{aligned} \quad (2.42)$$

Формула (2.42) справедлива при произвольных однородных начальных условиях. На основе данной формулы нетрудно вычислить равновесное значение матрицы \mathbf{T} :

$$\mathbf{T}_{eq} = \frac{1}{2N} \text{tr}(\mathbf{H}_0) \mathbf{E} + \frac{1}{2} \int_{\mathbf{k}} \mathbf{P} \text{diag}(\mathbf{P}^{*\top} \text{dev} \hat{\mathbf{H}}_0 \mathbf{P}) \mathbf{P}^{*\top} d\mathbf{k}. \quad (2.43)$$

Здесь в первом слагаемом \mathbf{H}_0 вычисляется при $\mathbf{x} = \mathbf{y}$. Заметим, что в формулу (2.42) входит только начальное значение гамильтониана и не входят начальные значения его производных.

В случае когда частицы в начальный момент времени имеют случайные начальные скорости и нулевые перемещения, формула (2.42) упрощается:

$$\text{tr} \mathbf{K} = \frac{1}{2} \text{tr} \mathbf{K}_0, \quad \text{dev} \mathbf{K} = \frac{1}{2} \int_{\mathbf{k}} \mathbf{P} \text{diag}(\mathbf{P}^{*\top} \text{dev} \mathbf{K}_0 \mathbf{P}) \mathbf{P}^{*\top} d\mathbf{k}. \quad (2.44)$$

Соответствующее выражение для равновесного значения матрицы \mathbf{T} принимает вид

$$\mathbf{T}_{eq} = \frac{1}{2N} \text{tr}(\mathbf{T}_0) \mathbf{E} + \frac{1}{2} \int_{\mathbf{k}} \mathbf{P} \text{diag}(\mathbf{P}^{*\top} \text{dev} \mathbf{T}_0 \mathbf{P}) \mathbf{P}^{*\top} d\mathbf{k}. \quad (2.45)$$

Таким образом, задача о распределении энергии по степеням свободы элементарной ячейки сводится к нахождению собственных векторов матрицы $\mathbf{\Omega}$ (столбцов матрицы \mathbf{P}) и подстановке результатов в формулу (2.43) или формулу (2.45). Формулы (2.43), (2.45) могут рассматриваться как замены теоремы о равном распределении для гармонических кристаллов. Формула (2.45) показывает, что если начальные кинетические энергии, соответствующие степеням свободы элементарной ячейки, равны ($\text{dev} \mathbf{T}_0 = 0$), то они также равны в равновесном состоянии ($\text{dev} \mathbf{T}_{eq} = 0$). Отметим, что при переходе к равновесию матрица \mathbf{T} , вообще говоря, не шаровая, т. е. $\text{dev} \mathbf{T} \neq 0$. Формула (2.45), впервые полученная в работе [46], носит название теоремы о неравном распределении. Примеры применения данной теории для нескольких конкретных систем приведены ниже.

2.8. Пример. Цепочка с чередующимися массами и жесткостями

2.8.1. Уравнения динамики

Рассмотрим двухатомную цепочку с чередующимися массами m_1 , m_2 и жесткостями c_1 , c_2 (см. рис. 2.1). Цепочка состоит из двух подрешеток, формируемых массами m_1 и m_2 . Данная модель часто рассматривается в качестве примера системы с двумя дисперсионными ветками [1, 59, 61, 62].

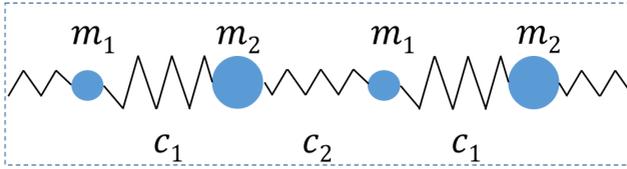


Рис. 2.1. Две элементарные ячейки двухатомной цепочки. Частицы разного размера принадлежат разным подрешеткам

Запишем уравнения движения в матричной форме (2.1). Элементарные ячейки нумеруются индексом j . Положение ячейки j задается вектором $\mathbf{x}_j = j\mathbf{b}$, где \mathbf{b} — базисный вектор, направленный вдоль цепочки. Каждая частица имеет одну степень свободы. Перемещения частиц ячейки j формируют столбец

$$\mathbf{u}_j = \mathbf{u}(\mathbf{x}_j) = (u_{1j}, u_{2j})^\top,$$

где u_{1j}, u_{2j} — перемещения частиц с массами m_1 и m_2 соответственно. Тогда уравнения движения имеют вид

$$M\ddot{\mathbf{u}}_j = C_1\mathbf{u}_{j+1} + C_0\mathbf{u}_j + C_{-1}\mathbf{u}_{j-1},$$

$$M = \begin{bmatrix} m_1 & 0 \\ 0 & m_2 \end{bmatrix}, \quad (2.46)$$

$$C_0 = \begin{bmatrix} -c_1 - c_2 & c_1 \\ c_1 & -c_1 - c_2 \end{bmatrix}, \quad C_1 = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ c_2 & 0 \end{bmatrix},$$

где $\mathbf{C}_{-1} = \mathbf{C}_1^\top$.

В начальный момент времени частицы имеют случайные скорости и нулевые перемещения:

$$u_{1j} = u_{2j} = 0, \quad \dot{u}_{1j} = \beta_j \sqrt{\frac{2}{m_1} T_{11}^0}, \quad \dot{u}_{2j} = \gamma_j \sqrt{\frac{2}{m_2} T_{22}^0}, \quad (2.47)$$

где T_{11}^0, T_{22}^0 — начальные энергии подрешеток, независящие от j ; β_j, γ_j — некоррелированные случайные числа с нулевым математическим ожиданием и единичной дисперсией, т. е. $\langle \beta_j \rangle = \langle \gamma_j \rangle = 0$, $\langle \beta_j^2 \rangle = \langle \gamma_j^2 \rangle = 1$, $\langle \beta_i \gamma_j \rangle = 0$ для всех i, j . Начальная матрица \mathbf{T}_0 , соответствующая условиям (2.47), имеет вид

$$\mathbf{T}_0 = \begin{bmatrix} T_{11}^0 & 0 \\ 0 & T_{22}^0 \end{bmatrix}, \quad 2T_{11}^0 = m_1 \langle \dot{u}_{1j}^2 \rangle, \quad 2T_{22}^0 = m_2 \langle \dot{u}_{2j}^2 \rangle. \quad (2.48)$$

Здесь скорости вычислены при $t = 0$.

Далее рассматривается поведение кинетических энергий подрешеток T_{11}, T_{22} .

2.8.2. Дисперсионное соотношение

Динамическая матрица $\mathbf{\Omega}$ вычисляется по формуле (2.22). Подставляя выражения (2.46) для матриц \mathbf{C}_α , $\alpha = 0; \pm 1$ в формулу (2.22), получим

$$\mathbf{\Omega} = \begin{bmatrix} \frac{c_1 + c_2}{m_1} & -\frac{c_1 + c_2 e^{-ip}}{\sqrt{m_1 m_2}} \\ -\frac{c_1 + c_2 e^{ip}}{\sqrt{m_1 m_2}} & \frac{c_1 + c_2}{m_2} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{k} = p\tilde{\mathbf{b}}, \quad (2.49)$$

где \mathbf{k} — волновой вектор; $\tilde{\mathbf{b}} \cdot \mathbf{b} = 1$; $p \in [0; 2\pi]$. Вычисление собственных чисел динамической матрицы дает дисперсионное соотношение

$$\omega_{1,2}^2(p) = \frac{\omega_{\max}^2}{2} \left(1 \pm \sqrt{1 - \frac{16c_1 c_2}{m_1 m_2 \omega_{\max}^4} \sin^2 \frac{p}{2}} \right), \quad (2.50)$$

$$\omega_{\max}^2 = \frac{(c_1 + c_2)(m_1 + m_2)}{m_1 m_2},$$

где индекс 1 у частоты соответствует знаку плюс. Функции $\omega_1(p)$ и $\omega_2(p)$ называются оптической и акустической ветками дисперсионного соотношения. Отметим, что $\omega_{1,2}/\omega_{\max}$ одинаково зависит от m_1/m_2 и c_1/c_2 . Дисперсионное соотношение для разных значений отношений жесткостей показано на рис. 2.2.

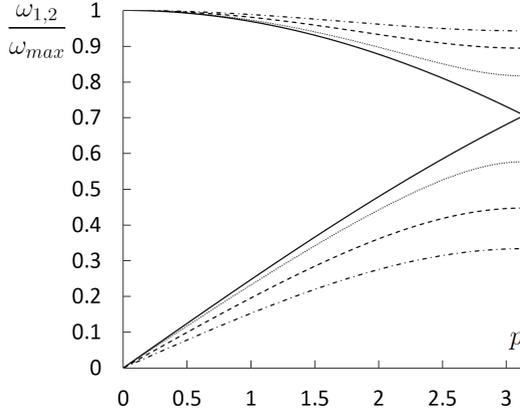


Рис. 2.2. Дисперсионное соотношение для цепочки с чередующимися жесткостями ($m_1 = m_2$). Кривые соответствуют разным отношениям жесткостей: $\frac{c_1}{c_2} = 1$ (сплошная линия); $\frac{1}{2}$ (точки); $\frac{1}{4}$ (пунктир); $\frac{1}{8}$ (штрих-пунктир)

Вычислим поляризационную матрицу \mathbf{P} . По определению матрица \mathbf{P} состоит из нормированных собственных векторов динамической матрицы $\mathbf{\Omega}$. Собственные векторы $\mathbf{p}_{1,2}$, соответствующие собственным числам $\omega_{1,2}^2$ (формула (2.50)), имеют вид

$$\mathbf{p}_{1,2} = \left[1 - \frac{m_1}{m_2} \pm \sqrt{\left(1 - \frac{m_1}{m_2}\right)^2 + 4|g|^2 \frac{m_1}{m_2}} \quad -2g\sqrt{\frac{m_1}{m_2}} \right]^\top, \quad (2.51)$$

$$g = \frac{c_1 + c_2 e^{ip}}{c_1 + c_2}.$$

Нормирование векторов $\mathbf{d}_{1,2}$ дает столбцы матрицы \mathbf{P} .

Далее формулы (2.50), (2.51) используются для описания поведения кинетических энергий подрешеток.

2.8.3. Колебания кинетической энергии

Рассмотрим колебания кинетической энергии $T = \frac{1}{2} (T_{11} + T_{22})$ и исследуем вклад акустических и оптических веток в данные колебания. Колебания вызваны уравниванием кинетической и потенциальной энергий.

В начальный момент времени частицы имеют случайные скорости и нулевые перемещения (2.47). Начальные кинетические энергии подрешеток равны ($T_{11}^0 = T_{22}^0$). Колебания кинетической энергии описываются формулой (2.29), которая в рассматриваемом случае принимает вид

$$T = \frac{T_0}{2} + T_{ac} + T_{op}, \quad (2.52)$$

$$T_{ac} = \frac{T_0}{8\pi} \int_0^{2\pi} \cos(2\omega_2(p)t) dp, \quad T_{op} = \frac{T_0}{8\pi} \int_0^{2\pi} \cos(2\omega_1(p)t) dp,$$

где $T_0 = \frac{1}{2} (T_{11}^0 + T_{22}^0)$ — начальная кинетическая энергия; дисперсионное соотношение $\omega_j(p)$, $j = 1, 2$ дано формулой (2.50). Вклады акустических и оптических колебаний даны слагаемыми T_{ac} , T_{op} . В дальнейшем интегралы в формуле (2.52) вычисляются численно. Интервал интегрирования разбивается на 10^3 одинаковых отрезков, на которых подынтегральное выражение считается постоянным.

Для проверки формулы (2.52) проводится сравнение с результатами численного решения уравнений динамики (2.46) с начальными условиями (2.47). В расчетах цепочка состоит из $5 \cdot 10^5$ частиц при периодических граничных условиях. Численное интегрирование проводится с использованием метода Верле с шагом $10^{-3}\tau_{\min}$, где $\tau_{\min} = 2\pi/\omega_{\max}$, ω_{\max} определена формулой (2.50). В процессе моделирования вычисляется полная кинетическая энергия цепочки. Зависимость энергии от времени для $m_2/m_1 = 4$ показана на рис. 2.3А. Видно, что аналитическое решение (2.52) совпадает с результатом численного интегрирования уравнений движения.

Рассмотрим вклады веток дисперсионного соотношения T_{ac} , T_{op} в колебания кинетической энергии. Зависимости T_{ac} , T_{op} от времени для $m_2 = 4m_1$, $c_1 = c_2$ показаны на рис. 2.3В. Видно, что вклад оптической ветки имеет форму биений, в то время как вклад акустической ветки имеет одну основную частоту. С использованием

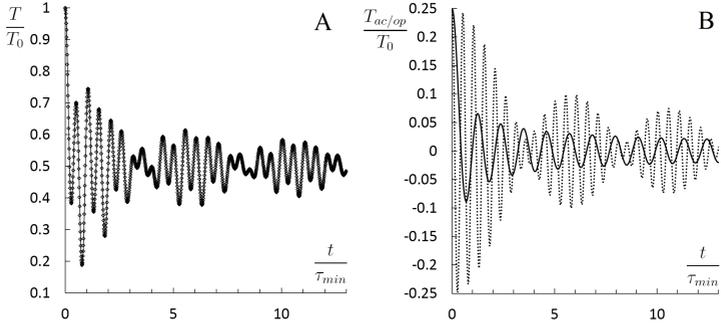


Рис. 2.3. А. Колебания кинетической энергии цепочки ($m_2 = 4m_1$, $c_1 = c_2$). Начальные энергии подрешеток равны. Сплошная линия — аналитическое решение (2.52), точки — численное решение. В. Вклады акустических (T_{ac} , сплошная линия) и оптических (T_{op} , точки) веток в колебания кинетической энергии ($m_2 = 4m_1$, $c_1 = c_2$)

метода стационарной фазы [60] можно показать, что частоты колебаний энергии принадлежат спектру цепочки. Групповые скорости, соответствующие данным частотам, равны нулю. Рис. 2.2 показывает, что групповая скорость акустических колебаний обращается в нуль при $p = \pi$, а оптических — при $p = 0$ и $p = \pi$. Соответствующие частоты имеют вид

$$\omega_1|_{p=0} = \omega_{\max},$$

$$\omega_1^2|_{p=\pi} = \frac{\omega_{\max}^2}{2} \left(1 + \sqrt{1 - \frac{16c_1c_2}{m_1m_2\omega_{\max}^4}} \right), \quad (2.53)$$

$$\omega_2^2|_{p=\pi} = \frac{\omega_{\max}^2}{2} \left(1 - \sqrt{1 - \frac{16c_1c_2}{m_1m_2\omega_{\max}^4}} \right).$$

На больших временах колебания кинетической энергии представляются в виде суммы трех гармоник с частотами (2.53) и амплитудами, затухающими обратно пропорционально \sqrt{t} . Разница между оптическими частотами $\omega_1|_{p=0}$ и $\omega_1|_{p=\pi}$ убывает с увеличением отношения масс, поэтому на рис. 2.3 наблюдаются биения. Аналогичные биения наблюдаются в треугольной решетке [63].

Рассмотрим влияние разницы кинетических энергий подрешеток T_{11}^0, T_{22}^0 на колебания полной кинетической энергии. Колебания для двух случаев: $T_{11}^0 \neq 0, T_{22}^0 = 0$ и $T_{11}^0 = 0, T_{22}^0 \neq 0$, показаны на рис. 2.4. Видно, что колебания существенно зависят от разности T_{11}^0 и T_{22}^0 . В обоих случаях аналитические результаты (2.29) практически совпадают с результатами численного моделирования.

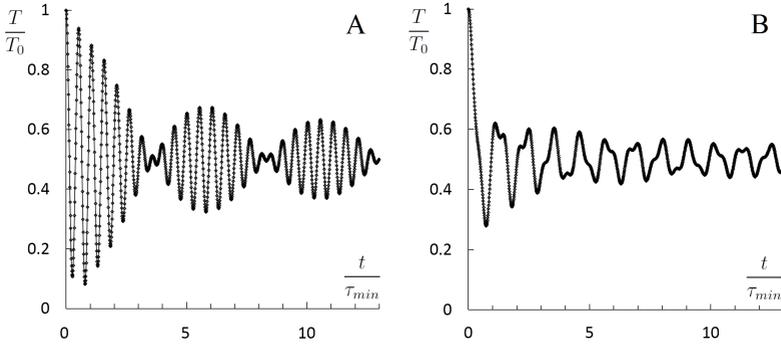


Рис. 2.4. Влияние начальных энергий подрешеток на колебания полной кинетической энергии ($m_2 = 4m_1, c_1 = c_2$). Здесь $T_{11}^0 \neq 0, T_{22}^0 = 0$ (слева) и $T_{11}^0 = 0, T_{22}^0 \neq 0$ (справа). Линия — аналитическое решение (2.29), точки — численное решение

Таким образом, колебания кинетической энергии в точности описываются формулой (2.29). Амплитуда колебаний затухает как $1/\sqrt{t}$. Основные частоты колебаний соответствуют нулевым групповым скоростям. Форма колебаний средней кинетической энергии T существенно зависит от соотношения между начальными энергиями подрешеток.

2.8.4. Перераспределение кинетической энергии между подрешетками

Рассмотрим случай, когда начальные энергии (температуры) подрешеток не равны ($T_{11}^0 \neq T_{22}^0$). Численное решение уравнений движения (2.46) показывает, что разница энергий подрешеток $T_{11} - T_{22}$ стремится к некоторому равновесному значению. Например, зависи-

мость $T_{11} - T_{22}$ для $m_2 = 4m_1$, $c_1 = c_2$ показана на рис. 2.5. Рассматриваются два случая: $T_{11}^0 \neq 0, T_{22}^0 = 0$ и $T_{11}^0 = 0, T_{22}^0 \neq 0$. Видно,

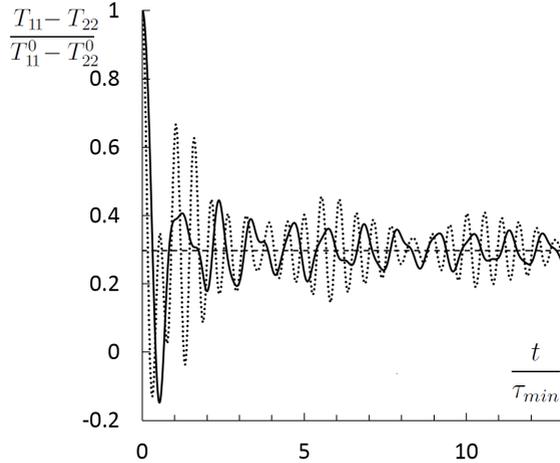


Рис. 2.5. Разница энергий подрешеток для $T_{11}^0 \neq 0, T_{22}^0 = 0$ (сплошная линия) и $T_{11}^0 = 0, T_{22}^0 \neq 0$ (точки). Здесь $m_2 = 4m_1$, $c_1 = c_2$

что в обоих случаях разница температур стремится к одному значению $0.3(T_{11}^0 - T_{22}^0)$, получающемуся из формулы (2.55). Отметим, что форма кривых для двух случаев заметно отличается. Следовательно, как и было показано ранее, процесс перераспределения энергии зависит от соотношения между начальными энергиями T_{11}^0 и T_{22}^0 .

Вычислим разницу энергий подрешеток в равновесном состоянии, используя теорему о неравном распределении (формулу (2.44)). Девiator матрицы \mathbf{T}_0 имеет вид

$$\text{dev} \mathbf{T}_0 = \frac{T_{11}^0 - T_{22}^0}{2} \mathbf{I}, \quad \mathbf{I} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad (2.54)$$

Подставляя (2.54) в формулу (2.44), получим

$$\mathbf{T}_{eq} = \frac{1}{4} (T_{11}^0 + T_{22}^0) \mathbf{E} + \frac{T_{11}^0 - T_{22}^0}{4\pi} \int_0^{2\pi} \mathbf{P} \text{diag} (\mathbf{P}^{*\top} \mathbf{I} \mathbf{P}) \mathbf{P}^{*\top} d\varphi. \quad (2.55)$$

Здесь матрица \mathbf{P} представлена формулой (2.51). Формула (2.55) дает равновесные значения энергий подрешеток. Интеграл в формуле (2.55) берется численно методом прямоугольников. Интервал интегрирования делится на 10^3 равных отрезков.

Рассмотрим случай равных масс $m_1 = m_2$. С использованием формулы (2.51) можно показать, что диагональные элементы матрицы $\mathbf{P}^{*\top} \mathbf{I} \mathbf{P}$ равны нулю. Тогда из формулы (2.55) следует, что для $m_1 = m_2$ и любого c_1/c_2 равновесные энергии подрешеток равны.

Для проверки формулы (2.55) проводилось сравнение с результатами численного решения уравнения (2.46) с начальными условиями (2.47). В расчетах цепочки состоят из 10^4 частиц при периодических граничных условиях. Рассматривается следующий диапазон параметров: $m_1/m_2 \in [0; 1]$ и $c_1/c_2 \in [0; 1]$. Численное интегрирование проводится с шагом $10^{-3} \tau_*$, где $\tau_* = \sqrt{\frac{c_1 + c_2}{m_1}}$. В начальный момент частицы имеют случайные скорости такие, что одна из подрешеток имеет нулевую энергию. В процессе моделирования вычисляются кинетические энергии подрешеток. Равновесные значения вычисляются посредством осреднения по временному интервалу $[t_{\max}/4; t_{\max}]$, где t_{\max} — полное время моделирования. Приемлемая точность достигается при $t_{\max} = 10^2 \tau_*$.

Равновесная разница между энергиями подрешеток показана на рис. 2.6. Видно, что для любого соотношения масс разница энергий уменьшается с уменьшением c_1/c_2 и стремится к некоторому предельному значению, соответствующему случаю $c_1/c_2 \rightarrow 0$. В частности, результаты для $c_2 = 64c_1$ и $c_2 = 32c_1$ практически неразличимы.

Таким образом, для рассматриваемой системы равновесные значения энергий (температур) подрешеток равны, если либо равны начальные энергии $T_{11}^0 = T_{22}^0$, либо равны массы частиц $m_1 = m_2$, а жесткости — произвольные. В общем случае кинетические энергии подрешеток не равны. Их значения в точности предсказываются формулой (2.55), следующей из теоремы о неравном распределении.

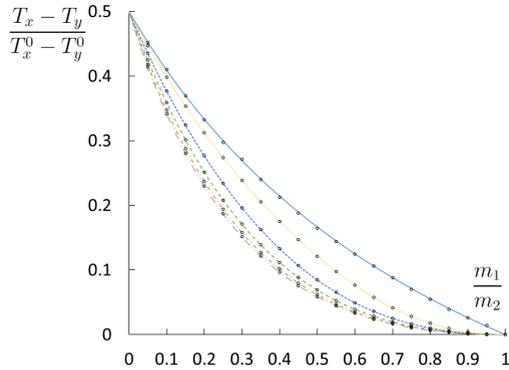


Рис. 2.6. Разница равновесных значений энергий подрешеток в двухатомной цепочке. Здесь T_{11}^0, T_{22}^0 — начальные энергии подрешеток. Линии — расчеты по формуле (2.55) при $\frac{c_1}{c_2} = 1$ (сплошная); $\frac{1}{2}$ (точки); $\frac{1}{4}$ (короткий пунктир); $\frac{1}{8}$ (пунктир); $\frac{1}{16}$ (штрих-пунктир); $\frac{1}{32}$ (штрих-пунктир с двумя точками). Круги — результаты численного интегрирования уравнений динамики (2.46)

2.9. Пример. Треугольная решетка (колебания в плоскости)

2.9.1. Общие соотношения

Развитый во второй главе подход позволяет с единых позиций описывать переходные процессы в простых и сложных решетках. Для демонстрации данного факта, рассмотрим треугольную решетку, совершающую колебания в плоскости. Ограничимся случаем взаимодействия ближайших соседей.

Линеаризованное уравнение движения частицы треугольной решетки с радиус-вектором \mathbf{x} имеет вид

$$M\dot{\mathbf{v}}(\mathbf{x}) = \sum_{\alpha} c_{\alpha} \mathbf{e}_{\alpha} \mathbf{e}_{\alpha} \cdot (\mathbf{u}(\mathbf{x} + \mathbf{a}_{\alpha}) - 2\mathbf{u}(\mathbf{x}) + \mathbf{u}(\mathbf{x} - \mathbf{a}_{\alpha})),$$

где $\mathbf{v}(\mathbf{x})$ — скорость частицы с радиус-вектором \mathbf{x} ; $\mathbf{e}_{\alpha} = \mathbf{a}_{\alpha}/|\mathbf{a}_{\alpha}|$; M — масса частицы. Суммирование ведется по неколлинеарным направлениям связей $\alpha = 1, 2, 3$.

Определим дисперсионное соотношение для треугольной решетки. Построение дисперсионного соотношения сводится к поиску собственных чисел динамической матрицы Ω , которая имеет вид

$$\Omega = \omega_*^2 \begin{bmatrix} 4 \sin^2 \theta_s - \sin^2 \theta_p + \sin^2(\theta_s + \theta_p) & -\sqrt{3} (\sin^2 \theta_p - \sin^2(\theta_s + \theta_p)) \\ -\sqrt{3} (\sin^2 \theta_p - \sin^2(\theta_s + \theta_p)) & 3 (\sin^2 \theta_p + \sin^2(\theta_s + \theta_p)) \end{bmatrix}.$$

Тогда дисперсионное соотношение определяется решением уравнения

$$\begin{aligned} & \omega^4 - 4\omega_*^2\omega^2 (\sin^2 \theta_s + \sin^2 \theta_p + \sin^2(\theta_s + \theta_p)) + \\ & + 12\omega_*^4 (\sin^2 \theta_s \sin^2 \theta_p + \sin^2(\theta_s + \theta_p)(\sin^2 \theta_s + \sin^2 \theta_p)) = 0. \end{aligned} \quad (2.56)$$

Две дисперсионные поверхности, рассчитанные на основе формулы (2.56), приведены на рис. 2.7.

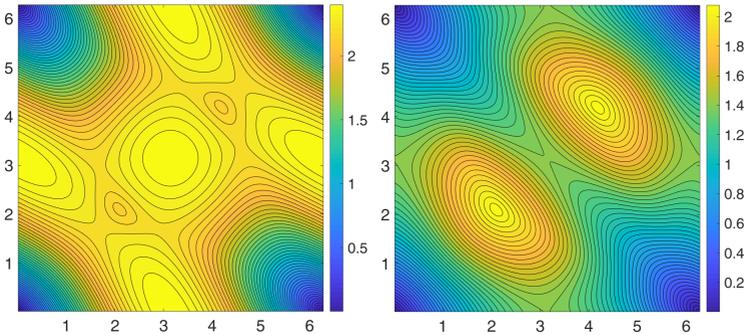


Рис. 2.7. Дисперсионные поверхности для двумерной треугольной решетки. Частота нормирована на ω_*

Далее дисперсионное соотношение будет использоваться для описания колебаний кинетической энергии.

2.9.2. Уравнивание кинетической и потенциальной энергий

Рассмотрим процесс уравнивания кинетической и потенциальной энергий. Поведение кинетической энергии в процессе уравнивания

описывается формулой

$$T = \frac{T_0}{2} + \frac{T_0}{4\pi^2}(I_1 + I_2), \quad I_j = \int_0^\pi \int_0^\pi \cos(2\omega_j(p, s)t) dp ds, \quad (2.57)$$

где ω_1, ω_2 — дисперсионные поверхности (2.56).

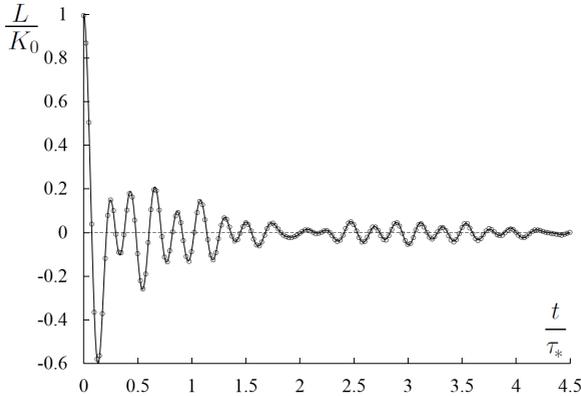


Рис. 2.8. Уравнение кинетической и потенциальной энергий в гармонической треугольной решетке со случайными начальными скоростями: линия — аналитическое решение; круги — численное решение уравнений динамики

Для проверки формулы (2.57) проводилось численное решение уравнений динамики решетки. Для численного интегрирования использовался метод Верле с шагом интегрирования $\tau = 10^{-3}\tau_*$. На рис. 2.8 представлен процесс уравнивания кинетической и потенциальной энергий. Видно, что аналитическое решение (2.57) в масштабе рисунка неотлично от результатов численного решения уравнений динамики решетки.

Анализ формулы (2.57) показывает, что отклонение кинетической энергии от среднего значения совершает затухающие колебания с амплитудой, обратно пропорциональной времени. За время порядка $10\tau_*$ отклонение уменьшается на два порядка.

Колебания кинетической энергии на больших временах определяются асимптотическим поведением интегралов I_j при $t \rightarrow \infty$.

В работе [63] показано, что колебания имеют три основные частоты:

$$\Omega_1 = \frac{9}{2}\omega_*, \quad \Omega_2 = 2\sqrt{6}\omega_*, \quad \Omega_3 = 2\sqrt{2}\omega_*.$$

Первые две частоты получаются из асимптотики интеграла I_1 , последняя — из интеграла I_2 . Отметим, что частоты Ω_1 и Ω_2 близки, что приводит к возникновению биений (см. рис. 2.9). Асимптотическая формула для кинетической энергии (температуры) на больших временах имеет вид [63]:

$$T \approx \frac{T_0}{2} \left[1 + \frac{1}{2\sqrt{2}\pi\omega_*t} \left(2\sqrt{\frac{6}{7}} \cos\left(\frac{9}{2}\omega_*t\right) + \sqrt{3} \sin\left(2\sqrt{6}\omega_*t\right) + \frac{3}{\sqrt{7}} \cos\left(2\sqrt{2}\omega_*t\right) \right) \right]. \quad (2.58)$$

Для проверки формулы (2.58) проведем сравнение с точным решением (2.57). Соответствующие зависимости температуры от времени показаны на рис. 2.9.

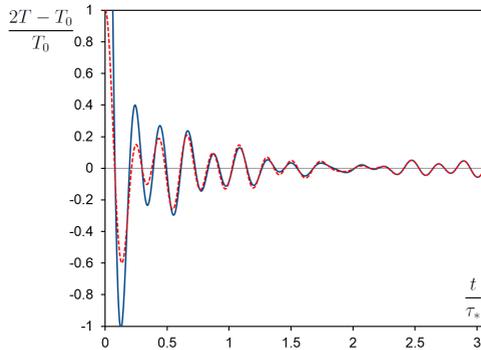


Рис. 2.9. Колебания кинетической энергии в гармонической треугольной решетке со случайными начальными скоростями: пунктир — точная формула; сплошная линия — асимптотическая формула (2.58)

Видно, что асимптотическая формула (2.58) быстро сходится к точному решению и может быть использована для расчетов уже начиная с времен $t \sim \tau_*$.

2.9.3. Вычисление ковариации деформаций в задачах о тепловом расширении

В работах [64, 65] показано, что ковариация деформаций связей 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:

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= \left\langle (\mathbf{u}(\mathbf{r} + \mathbf{a}_\alpha) - \mathbf{u}(\mathbf{r}))(\mathbf{u}(\mathbf{r} + \mathbf{a}_\alpha) - \mathbf{u}(\mathbf{r})) \right\rangle = \\ &= (2U(0) - U(\mathbf{a}_\alpha) - U(-\mathbf{a}_\alpha)), \quad U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \left\langle \mathbf{u}(\mathbf{r}_1)\mathbf{u}(\mathbf{r}_2) \right\rangle. \end{aligned}$$

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 характеризуют продольные и поперечные деформации связи, вызванные тепловым движением частиц. В работе [65] 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 (2.31). Как и ранее, уравнения решаются для ячейки периодичности в форме ромба. Используются следующие начальные условия:

$$U = 0, \quad \dot{U} = 0, \quad \mathbf{K} = K_0 \delta_D(\mathbf{x} - \mathbf{y})\mathbf{E}, \quad \dot{\mathbf{K}} = 0.$$

При этом значение K_0 не влияет на отношение A_{yy}/A_{xx} . Для численного решения уравнений (2.31) используется алгоритм Верле с шагом по времени $10^{-3}\tau_*$. В результате решения получаются следующее соотношение между компонентами тензора \mathbf{A} :

$$\frac{A_{yy}}{A_{xx}} \approx 1.43. \quad (2.59)$$

Формула (2.59) хорошо согласуется с результатами молекулярно-динамического моделирования, проведенного для кристалла Леннарда-Джонса в [65], где было получено $A_{yy}/A_{xx} \approx 1.435$.

Таким образом, подход, рассмотренный в данном пункте, может

использоваться в том числе и для вычисления характеристик движения, определяющих тепловое расширение кристаллов.

2.10. Пример. Решетка графена (поперечные колебания)

2.10.1. Уравнения динамики

Рассмотрим поперечные колебания растянутого графенового листа (см. рис. 2.10). Колебания в плоскости исследуются в работе [47] в рамках более сложной модели. Они могут рассматриваться независимо, так как в линейном приближении поперечные колебания и колебания в плоскости независимы. Элементарные ячейки, содержащие по две частицы, нумеруются парой индексов: i, j (см. рис. 2.10). Базисные векторы \mathbf{b}_1 и \mathbf{b}_2 имеют вид

$$\mathbf{b}_1 = \frac{\sqrt{3}a}{2} (\mathbf{i} + \sqrt{3}\mathbf{j}), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{\sqrt{3}a}{2} (\sqrt{3}\mathbf{j} - \mathbf{i}),$$

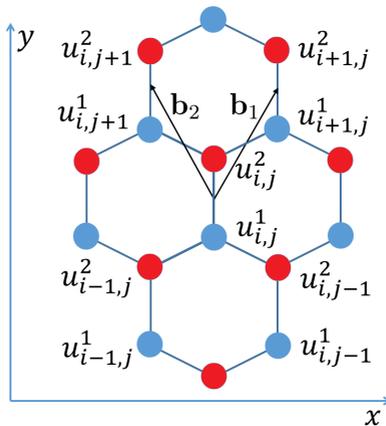


Рис. 2.10. Нумерация элементарных ячеек в решетке графена. Подрешетки помечены разными цветами. Здесь \mathbf{b}_1 , \mathbf{b}_2 — базисные векторы решетки. Частицы движутся вдоль нормали к плоскости рисунка

где \mathbf{i}, \mathbf{j} — векторы декартова базиса, соответствующие осям x и y соответственно (см. рис. 2.10). Положения элементарных ячеек представляются через базисные векторы следующим образом:

$$\mathbf{x}_{i,j} = i\mathbf{b}_1 + j\mathbf{b}_2.$$

Каждая частица имеет одну степень свободы. Перемещения частиц элементарной ячейки i, j формируют столбец:

$$\mathbf{u}_{i,j} = \mathbf{u}(\mathbf{x}_{i,j}) = (u_{i,j}^1, u_{i,j}^2)^\top,$$

где $u_{i,j}^1, u_{i,j}^2$ — перемещения частиц двух подрешеток.

Рассмотрим уравнение движения ячейки i, j . Каждая частица соединена с тремя соседями линейными пружинками (сплошные линии на рис. 2.10). Равновесная длина пружинки меньше, чем начальное расстояние между частицами, следовательно лист графена растянут. Тогда уравнения движения имеют вид

$$\begin{aligned} M\ddot{\mathbf{u}}_{i,j} &= \mathbf{C}_1\mathbf{u}_{i+1,j} + \mathbf{C}_{-1}\mathbf{u}_{i-1,j} + \\ &+ \mathbf{C}_0\mathbf{u}_{i,j} + \mathbf{C}_2\mathbf{u}_{i,j+1} + \mathbf{C}_{-2}\mathbf{u}_{i,j-1}, \end{aligned} \quad (2.60)$$

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} m & 0 \\ 0 & m \end{bmatrix}, \quad \mathbf{C}_0 = \begin{bmatrix} -3c & c \\ c & -3c \end{bmatrix}, \quad \mathbf{C}_1 = \mathbf{C}_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ c & 0 \end{bmatrix}.$$

Здесь $\mathbf{C}_{-1} = \mathbf{C}_1^\top$, $\mathbf{C}_{-2} = \mathbf{C}_2^\top$; m — масса частицы; c — жесткость, определяемая начальным натяжением.

В начальный момент времени частицы имеют случайные скорости и нулевые перемещения:

$$u_{i,j}^1 = u_{i,j}^2 = 0, \quad \dot{u}_{i,j}^1 = \beta_{i,j} \sqrt{\frac{2}{m} T_{11}^0}, \quad \dot{u}_{i,j}^2 = \gamma_{i,j} \sqrt{\frac{2}{m} T_{22}^0}, \quad (2.61)$$

где T_{11}^0, T_{22}^0 — энергии подрешеток, независящие от i, j ; $\beta_{i,j}, \gamma_{i,j}$ — некоррелированные случайные числа с нулевым математическим ожиданием и единичной дисперсией, т. е. $\langle \beta_{i,j} \rangle = \langle \gamma_{i,j} \rangle = 0$, $\langle \beta_{i,j}^2 \rangle = \langle \gamma_{i,j}^2 \rangle = 1$, $\langle \beta_{i,j} \gamma_{s,p} \rangle = 0$ для всех i, j, s, p . Начальная матрица \mathbf{T}_0 ,

соответствующая начальным условиям (2.61), имеет вид

$$\mathbf{T}_0 = \begin{bmatrix} T_{11}^0 & 0 \\ 0 & T_{22}^0 \end{bmatrix}, \quad 2T_{11}^0 = m \langle (\dot{u}_{i,j}^1)^2 \rangle, \quad 2T_{22}^0 = m \langle (\dot{u}_{i,j}^2)^2 \rangle. \quad (2.62)$$

Здесь скорости вычислены при $t = 0$. Далее рассматривается поведение энергий подрешеток T_{11} , T_{22} .

2.10.2. Дисперсионное соотношение

Вычислим дисперсионное соотношение для рассматриваемой модели графена. Динамическая матрица $\mathbf{\Omega}$ вычисляется по формуле (2.22). Подставляя формулы (2.60) для матриц \mathbf{C}_α , $\alpha = 0; \pm 1; \pm 2$ в формулу (2.22), получим:

$$\mathbf{\Omega} = \omega_*^2 \begin{bmatrix} 3 & -1 - e^{-ip_1} - e^{-ip_2} \\ -1 - e^{ip_1} - e^{ip_2} & 3 \end{bmatrix}, \quad (2.63)$$

$$p_1 = \mathbf{k} \cdot \mathbf{b}_1, \quad p_2 = \mathbf{k} \cdot \mathbf{b}_2,$$

где \mathbf{k} — волновой вектор; $\omega_*^2 = \frac{c}{m}$; $p_1, p_2 \in [0; 2\pi]$ — безразмерные компоненты волнового вектора.

Собственные числа ω_1^2, ω_2^2 матрицы $\mathbf{\Omega}$ дают дисперсионное соотношение

$$\omega_{1,2}^2 = \omega_*^2 \left(3 \pm \sqrt{3 + 2(\cos p_1 + \cos p_2 + \cos(p_1 - p_2))} \right), \quad (2.64)$$

где индекс 1 соответствует знаку «плюс». Функции $\omega_1(p_1, p_2)$, $\omega_2(p_1, p_2)$ называются оптической и акустической дисперсионными поверхностями (см. рис. 2.11). Собственные векторы матрицы $\mathbf{\Omega}$ дают столбцы матрицы \mathbf{P} :

$$\mathbf{P} = \frac{1}{\sqrt{|g|^2 + g^2}} \begin{bmatrix} |g| & |g| \\ -g & g \end{bmatrix}, \quad g = 1 + e^{ip_1} + e^{ip_2}. \quad (2.65)$$

Далее формулы (2.63), (2.64), (2.65) используются для описания переходных процессов в решетке графена.

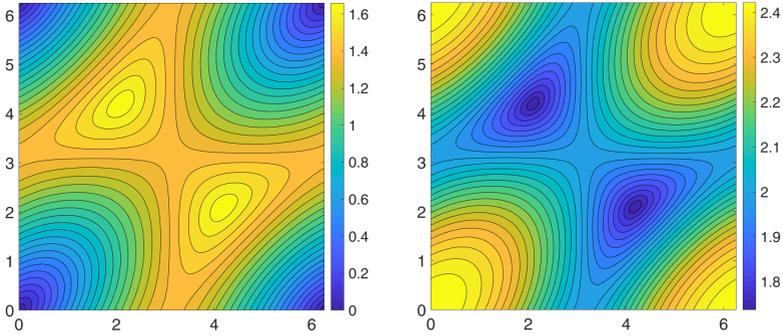


Рис. 2.11. Акустическая ($\omega_2(p_1, p_2)/\omega_*$, слева) и оптическая ($\omega_1(p_1, p_2)/\omega_*$, справа) дисперсионные поверхности (2.64) для решетки графена

2.10.3. Колебания кинетической энергии

Рассмотрим колебания величины $T = \frac{1}{2}(T_{11} + T_{22})$, пропорциональной полной кинетической энергии решетки графена.

В общем случае колебания описываются формулой (2.28). Используя формулы (2.62), (2.65), можно показать, что диагональные элементы матрицы $\mathbf{P}^{*\top} \text{dev} \mathbf{T}_0 \mathbf{P}$ равны нулю. Тогда из формулы (2.28) следует, что колебания полной кинетической энергии не зависят от соотношения между энергиями подрешеток T_{11}^0 и T_{22}^0 . Для описания этих колебаний может использоваться формула (2.29):

$$T = \frac{T_0}{2} + T_{ac} + T_{op},$$

$$T_{ac} = \frac{T_0}{16\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \cos(2\omega_2(p_1, p_2)t) dp_1 dp_2, \quad (2.66)$$

$$T_{op} = \frac{T_0}{16\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \cos(2\omega_1(p_1, p_2)t) dp_1 dp_2,$$

где $T_0 = \frac{1}{2}(T_{11}^0 + T_{22}^0)$ — начальная кинетическая энергия; функции $\omega_{1,2}(p_1, p_2)$ определены формулой (2.64). В дальнейшем интегралы в формуле (2.66) вычисляются через сумму Римана. Область интегрирования при этом разбивается на 400×400 одинаковых квадратов.

Для проверки формулы (2.66) проведем сравнение результатов

с численным решением уравнений динамики (2.60) при начальных условиях (2.61). В расчетах лист графена содержит $10^3 \times 10^3$ элементарных ячеек при периодических граничных условиях. Численное интегрирование проводится методом Верле с шагом $5 \cdot 10^{-3} \tau_*$, где $\tau_* = 2\pi/\omega_*$. В процессе моделирования вычисляется полная кинетическая энергия системы. В таком случае осреднение по реализациям не требуется. Поведение кинетической энергии показано на рис. 2.12А. Видно, что формула (2.66) точно описывает колебания

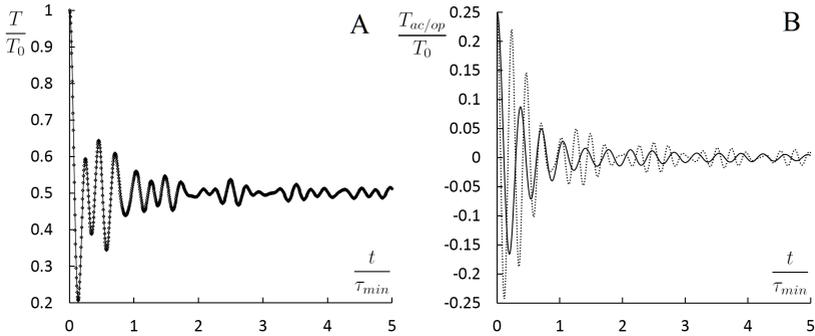


Рис. 2.12. А. Колебания кинетической энергии в листе графена. Точки — численное решение уравнений движения (2.60), линия — аналитическое решение (2.66). В. Вклад акустической (T_{ac} , сплошная линия) и оптической (T_{op} , точки) дисперсионных поверхностей в колебания кинетической энергии в графене

кинетической энергии. Вычисления с разными начальными энергиями подрешеток ($T_{11}^0 \neq T_{22}^0$) подтверждают наше заключение о том, что отношение данных энергий не влияет по поведение T .

Вклад двух дисперсионных поверхностей в колебания кинетической энергии показан на рис. 2.12В. Вклады даны интегралами T_{ac} и T_{op} (см. формулу (2.66)). Видно, что колебания, соответствующие вкладу оптической поверхности, имеют две основные частоты, в то время как колебания, соответствующие вкладу акустической поверхности, имеют только одну частоту. Данные частоты могут быть определены с использованием асимптотического анализа интегралов (2.66) на больших временах t с использованием метода стационарной фазы [60].

Таким образом, колебания кинетической энергии точно описываются формулой (2.66). Амплитуда данных колебаний затухает, как $1/t$. Формула справедлива при произвольном соотношении начальных энергий подрешеток.

2.10.4. Перераспределение энергии между подрешетками

Рассмотрим поведение энергий подрешеток в случае $T_{11}^0 \neq T_{22}^0$. Равновесные значения энергий подрешеток вычисляются с использованием формулы (2.44). Соответствующие выражения для начальной матрицы \mathbf{T} даны формулой (2.62). Матрица $\mathbf{P}^{*\top} \text{dev} \mathbf{T}_0 \mathbf{P}$ в формуле (2.44) имеет нулевые диагональные элементы. Тогда из формулы (2.44) следует, что $\text{dev} \mathbf{T}_{eq} = 0$, т. е. энергии подрешеток со временем уравниваются.

Для проверки данного факта проводилось численное решение уравнений движения (2.60) с начальными условиями (2.61). Рассматривалась ячейка периодичности, содержащая $10^3 \times 10^3$ элементарных ячеек. В начальный момент времени частицы одной подрешетки имеют случайные скорости, а второй — неподвижны. Начальные перемещения равны нулю. Численное интегрирование проводилось с шагом $5 \cdot 10^{-3} \tau_*$, где $\tau_* = 2\pi/\omega_*$. Зависимость разности энергий $T_{11} - T_{22}$ от времени приведена на рис. 2.13. Видно, что разница энергий со-

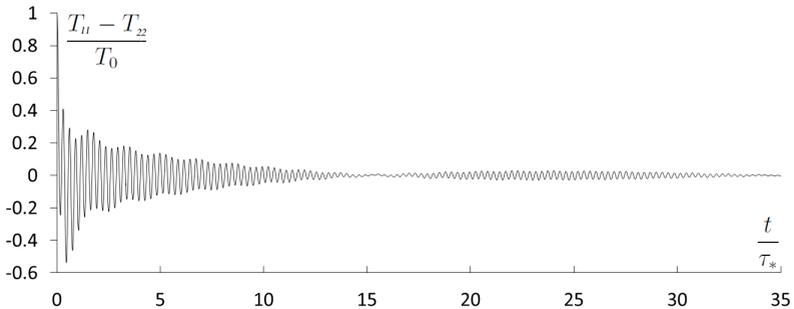


Рис. 2.13. Перераспределение энергии между подрешетками в графене (численное решение уравнений движения (2.60))

вершает колебания, похожие на биения. Амплитуда биений затухает, как $1/t$. Таким образом, на больших временах энергии подрешеток

в графене уравниваются даже в гармонической модели. Обычно для уравнивания необходимо наличие нелинейности (см. пункт 2.11 и работы [24, 45]).

2.11. О влиянии нелинейности на переходные процессы

Исследуем влияние малой нелинейности межчастичных взаимодействий на рассматриваемые в пособии переходные процессы. В качестве примера нелинейного кристалла рассмотрим двумерную треугольную решетку с взаимодействиями, описываемыми потенциалом Леннарда-Джонса:

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

где ε — энергия связи; a — равновесное расстояние. Учитываются взаимодействия только 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 нулю.

Варьируя амплитуду начальных скоростей частиц (температуру), можно изменять степень влияния нелинейности на поведение системы. Покажем, что при малых скоростях частиц (низких температурах) переходные 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. 2.14. Видно, 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. При увеличении амплитуды начальных скоростей частиц влияние нелинейности приводит к тому, что кинетическая и потенциальная энергии выравниваются быстрее, чем в гармоническом кристалле.

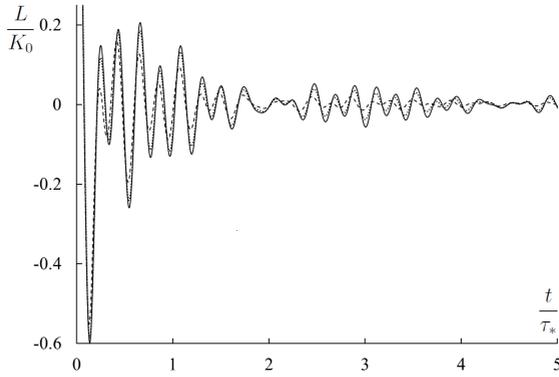


Рис. 2.14. Затухание лагранжиана в треугольной решетке с взаимодействиями Леннарда-Джонса. Частицы имеют случайные скорости, равномерно распределенные в круге радиуса v_0 : сплошная линия — $v_0/v_d = 0.05$; точка — $v_0/v_d = 0.25$; пунктирная линия — $v_0/v_d = 0.5$

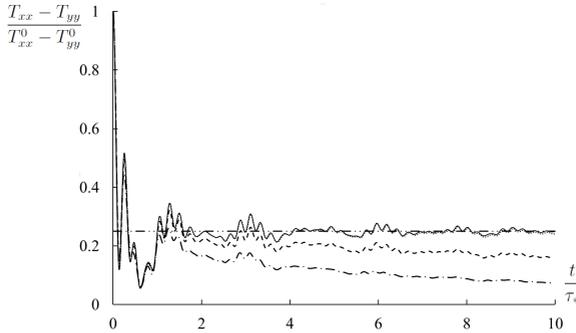


Рис. 2.15. Перераспределение энергии по пространственным направлениям в треугольной решетке с взаимодействиями Леннарда-Джонса. Частицы имеют случайные скорости, равномерно распределенные в круге радиуса v_0 : точка — $v_0/v_d = 0.05$; пунктирная линия — $v_0/v_d = 0.25$; штрих-пунктирная линия — $v_0/v_d = 0.5$; штрих-пунктирная линия с двумя точками — аналитическое решение стационарной задачи для гармонического кристалла; сплошная линия — численное решение уравнений динамики решетки

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 кинетических энергий T_{xx} , T_{yy} , соответствующих направлениям x и y . Зависимость $T_{xx} - T_{yy}$ от времени представлена на рис. 2.15. 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, как и предсказывает линейная модель, затем медленно стремится к нулю.

Таким образом, при малой нелинейности и на не слишком больших временах поведение кристалла хорошо описывается гармонической моделью. Наличие нелинейности приводит к ускорению переходных процессов. Кинетическая и потенциальная энергии в нелинейном кристалле выравниваются быстрее, чем в гармоническом. Кроме того, наличие нелинейности приводит к появлению дополнительного медленного эволюционного процесса, в результате которого кинетические энергии, соответствующие различным степеням свободы, уравниваются. Скорость эволюционного процесса зависит от степени нелинейности. Более подробно вопросы, связанные с влиянием нелинейности на переходные процессы, рассмотрены в работе [45] на примере ГЦК-решетки с взаимодействиями, описываемыми потенциалом Леннарда-Джонса.

2.12. Заключительные замечания

В данной главе подход к описанию переходных процессов в деформируемых твердых телах обобщен на случай идеальных кристаллов со сложной решеткой, элементарная ячейка которой содержит произвольное число частиц с произвольным числом степеней свободы. Уравнения динамики решетки записаны в общем матричном виде, что позволяет с единых позиций рассматривать широкий класс простых и сложных решеток с взаимодействием произвольного числа соседей. Получена общая формула для динамической матрицы, позволяющая получить дисперсионное соотношение.

Исследованы переходные процессы в кристаллах со случайными начальными условиями. Введены ковариации скоростей частиц, на-

ходящихся в двух элементарных ячейках. В рассмотренном случае ковариации задаются квадратными матрицами с размерностью, равной числу степеней свободы элементарной ячейки. Получены уравнения, описывающие динамику ковариаций. Начальные условия к данным уравнениям являются детерминированными. Уравнения описывают, в частности, два переходных процесса: колебания кинетической энергии системы, связанные с уравниванием кинетической и потенциальной энергий и перераспределением кинетической энергии по степеням свободы элементарной ячейки.

Показано, что для описания колебаний кинетической энергии достаточно рассмотрения ковариации скоростей. Получено точное решение уравнения динамики ковариаций скоростей. Выведена формула (2.26), описывающая колебания кинетической энергии в случае произвольного начального распределения кинетической энергии между подрешетками.

Для описания процесса перераспределения энергии по степеням свободы элементарной ячейки введены обобщенная кинетическая и потенциальная энергии, а также обобщенный гамильтониан системы. Показано, что для обобщенного гамильтониана выполняется ряд законов сохранения. В частности, сохраняется его след. Данный факт позволяет записать уравнение для девиатора обобщенного гамильтониана, описывающее процесс перераспределения энергии по степеням свободы элементарной ячейки.

После затухания переходных процессов система переходит в практически стационарное состояние, определяемое как состояние, в котором вторые производные ковариаций равны нулю. Показано, что в стационарном состоянии обобщенные кинетическая и потенциальная энергии равны. С использованием законов сохранения для обобщенного гамильтониана и уравнений динамики получена система уравнений (2.38), связывающих значения обобщенных энергий в стационарном состоянии с начальными условиями. Показано, в частности, что на стационарное состояние оказывает влияние только начальное значение гамильтониана и не влияют его производные. Получено общее решение (2.43) системы уравнения (2.38). Данное решение можно рассматривать в качестве замены теоремы о равном распределении для гармонических кристаллов, для которых обычная теорема о равном распределении не выполняется.

В качестве примера исследован переход к равновесию в трех ре-

шетах, элементарная ячейка которых имеет две степени свободы: цепочке с чередующимися массами и жесткостями, двумерной треугольной решетке и решетке графена, совершающей поперечные колебания.

Для цепочки с чередующимися массами и жесткостями на основе общего решения (2.26) построена зависимость кинетической энергии от времени. Показано, что при переходе к равновесию кинетическая энергия совершает колебания около равновесного значения, равного половине начальной энергии. Отклонение от стационарного значения совершает затухающие колебания с амплитудой, обратно пропорциональной корню из времени. Проведено сравнение с численным решением уравнений динамики решетки. Показано, что аналитические и численные результаты практически совпадают. Рассмотрены начальные условия, при которых подрешетки имеют случайные скорости, соответствующие различным начальным энергиям, и нулевые перемещения. На основе формулы (2.43) построена зависимость разности энергий подрешеток в стационарном состоянии от соотношения масс и жесткостей. Показано, что в случае, если частицы имеют одинаковые массы, в стационарном состоянии для системы выполняется теорема о равном распределении для произвольного соотношения между жесткостями пружинок. Если массы подрешеток различны, теорема о равном распределении не выполняется. Отношение разности температур в стационарном состоянии к начальной разности температур монотонно меняется в интервале от $\frac{1}{2}$ (при массе одной из подрешеток, стремящейся к нулю) до 0 (когда массы подрешеток равны).

Рассмотрены переходные процессы в треугольной решетке, совершающей колебания в плоскости. Для данной решетки построено дисперсионное соотношение. Подстановка дисперсионного соотношения в общую формулу (2.26) позволила описать колебания кинетической энергии. Отметим, что в работе [24] для получения аналогичного результата использовался более сложный подход, основанный на аналогии между уравнениями динамики решетки и приближенными уравнениями динамики ковариаций. Показано, что колебания температуры затухают обратно пропорционально времени и имеют три основные частоты, две из которых близки, что приводит к биениям. Показано, что полученные уравнения динамики ковариации перемещений могут использоваться для оценки характеристик теплового

движения, определяющих тепловое расширение кристалла.

Рассмотрена простейшая модель графенового листа, совершающего поперечные колебания. На основе общего решения (2.26) построена зависимость кинетической энергии от времени. Показано, что при переходе к равновесию кинетическая энергия совершает колебания около равновесного значения, равного половине начальной энергии. Отклонение от стационарного значения совершает затухающие колебания с амплитудой, обратно пропорциональной времени. Проведено сравнение с численным решением уравнений динамики решетки. Показано, что аналитические и численные результаты практически совпадают. Рассмотрены начальные условия, при которых подрешетки имеют случайные скорости, соответствующие различным начальным энергиям, и нулевые перемещения. Показано, что в рассмотренной линейной модели графена энергии подрешеток уравниваются, хотя обычно для уравнивания требуется нелинейность.

Численно исследовано влияние нелинейности. На примере треугольной решетки с взаимодействиями Леннарда-Джонса показано, что переход к стационарному состоянию в слабо нелинейных кристаллах имеет два временных масштаба. На малых временах переходные процессы хорошо описываются гармонической моделью, в то время как на больших временах добавляется новый эволюционный процесс, связанный с нелинейностью. В частности, нелинейность приводит к постепенному уравниванию кинетических энергий, соответствующих движению частиц в различных направлениях. Скорость уравнивания увеличивается с ростом нелинейности (температуры). Аналогичная зависимость более подробно исследуется на примере гранцентрированной кубической решетки в работе [45].

Результаты, представленные в главе 2, и их развитие опубликованы в работах [24, 35, 45–47, 63].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В учебном пособии изложен подход к аналитическому описанию переходных процессов в деформируемых твердых телах с кристаллической структурой. С использованием матричной записи уравнений динамики исследованы переходные процессы в гармонических кристаллах с различными видами решетки и взаимодействием произвольного числа соседей. Рассмотрены начальные условия, при которых частицы имеют случайные скорости и нулевые перемещения. Такие начальные условия могут интерпретироваться как результат воздействия на систему ультракороткого лазерного импульса. При этом энергия, вообще говоря, неравномерно распределена по степеням свободы элементарной ячейки. Кроме того, начальная кинетическая энергия не равна потенциальной. Движение системы сопровождается двумя переходными процессами: уравниванием кинетической и потенциальной энергий и перераспределением кинетической энергии по степеням свободы элементарной ячейки. Для описания данных процессов в учебном пособии используется подход, основанный на введении ковариаций перемещений и скоростей частиц. В простейшем случае скалярных решеток данные величины — скаляры, а в случае сложных решеток — квадратные матрицы с размерностью, равной числу степеней свободы элементарной ячейки.

Получены дифференциально-разностные уравнения четвертого порядка по времени, описывающие изменение ковариаций. Начальные условия для ковариаций — детерминированные. Получены точные решения уравнений динамики ковариаций, описывающие упомянутые переходные процессы. Показано, что динамика переходных процессов определяется дисперсионным соотношением рассматриваемого кристалла. Обобщая полученные для различных систем результаты, можно сказать, что переходные процессы сопровождаются затухающими колебаниями кинетической и потенциальной энер-

гий. Характерные частоты данных колебаний имеют порядок максимальной частоты в решетке, а затухание происходит по степенному закону.

Показано, что со временем система стремится к стационарному состоянию, в котором вторые производные ковариаций по времени равны нулю. Введены обобщенные кинетическая и потенциальная энергии, а также обобщенный гамильтониан и лагранжиан. Для обобщенного гамильтониана получен ряд законов сохранения. С использованием законов сохранения и уравнений динамики получена система уравнений, связывающая значения обобщенных энергий в стационарном состоянии с начальными условиями (аналог теоремы о равном распределении). Показано, что в стационарном состоянии обобщенные кинетическая и потенциальная энергии равны. При этом кинетическая энергия, вообще говоря, не равным образом распределена по степеням свободы элементарной ячейки. Получена формула, связывающая равновесные значения кинетических энергий с начальными условиями.

Для демонстрации предложенного подхода рассмотрен ряд конкретных решеток: цепочка Гука; одномерная цепочка с чередующимися массами и жесткостями; квадратная и треугольные решетки, совершающие поперечные колебания; двумерная треугольная решетка; решетка графена, совершающая поперечные колебания. Для данных решеток решена задача о колебаниях кинетической энергии в случае, когда частицы имеют случайные начальные скорости и нулевые перемещения. Для решеток, элементарная ячейка которых имеет несколько степеней свободы, также решена задача о перераспределении кинетической энергии по степеням свободы. Показано, что аналитические результаты хорошо согласуются с результатами прямого численного интегрирования уравнений динамики решетки.

Представленный подход к описанию переходных термомеханических процессов получил свое развитие, в частности, в работах [45, 47, 66, 67]. В работе [47] подход использовался для описания колебаний и перераспределения кинетической энергии по степеням свободы в гармонической решетке графена, совершающей колебания в плоскости листа. В работе [66] исследовалось влияние вязкого трения на переход к равновесию для одномерного гармонического кристалла, погруженного в вязкую среду. Показано, в частности, что наличие вязкости существенно влияет на асимптотическое поведение кине-

тической и потенциальной энергий на больших временах. Влияние конечности кристалла на колебания энергий и изменение во времени дисперсии перемещений частиц одномерного кристалла рассматривалось в работе [67], в результате чего было обнаружено явление теплового эха. В работе [45] на примере ГЦК решетки с взаимодействиями Леннарда-Джонса показано, что в нелинейных кристаллах переходные процессы имеют два характерных масштаба времени. Первый масштаб по порядку величины совпадает с минимальным периодом колебаний атомов кристалла. На данном временном масштабе переходные процессы в нелинейном кристалле хорошо описываются формулами, полученными в данном пособии в рамках гармонического приближения. Второй масштаб времени, присутствующий только в нелинейном случае, зависит от величины начальной энергии (температуры) системы. Показано, что данный масштаб можно использовать для нормировки времени. Нормировка позволяет численно получить единую кривую, описывающую выравнивание кинетических энергий в ГЦК решетке при разных начальных значениях энергии.

Таким образом, изложенный в пособии подход является эффективным инструментом для исследования переходных термомеханических процессов, полный спектр возможных применений которого в настоящий момент далек от исчерпания.

Авторы выражают искреннюю благодарность И. Е. Беринскому, Е. Н. Вильчевской, С. Н. Гаврилову, М. А. Гузеву, С. В. Дмитриеву, Е. А. Ивановой, Д. А. Индейцеву, Н. Ф. Морозову, Е. А. Корзниковой, О. С. Лобода, С. Д. Ляжкову, А. С. Мурачеву, В. Мюллеру, А. А. Соколову, А. Ю. Панченко, Е. А. Подольской, А. В. Порубову, С. А. Руколайне, В. А. Цаплину, Е. В. Шишкиной за полезные обсуждения подходов и результатов, приведенных в данном пособии.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. **Ziman J.** Electrons and phonons. The theory of transport phenomena in solids / J. Ziman. — New York : Oxford University Press, 1960.
2. Computational statistical mechanics. Studies in modern thermodynamics / ed. by W. Hoover. — Livermore : Elsevier Science, 1991.
3. Shock-wave structure via nonequilibrium molecular dynamics and Navier-Stokes continuum mechanics / B. Holian [et al.] // *Physical Review A*. — 1980. — Vol. 22. — P. 2798.
4. **Linde D.** Laser-solid interaction in the femtosecond time regime / D. Linde, K. Sokolowski-Tinten, J. Bialkowski // *Applied Surface Science*. — 1997. — Vol. 109. — P. 1.
5. **Casas-Vazquez J.** Temperature in non-equilibrium states: a review of open problems and current proposals / J. Casas-Vazquez, D. Jou // *Reports on Progress in Physics*. — 2003. — Vol. 66. — P. 1937.
6. **Holian B.** Heat-flow equation motivated by the ideal-gas shock wave / B. Holian, M. Mareschal // *Physical Review E*. — 2010. — Vol. 82. — P. 026707.
7. **Hoover W.** Shock-wave compression and Joule-Thomson expansion / W. Hoover, C. Hoover, K. Travis // *Physical Review Letters*. — 2014. — Vol. 112. — P. 144504.
8. Slow thermal equilibration in methylammonium lead iodide revealed by transient mid-infrared spectroscopy / P. Guo [et al.] // *Nature Communications*. — 2018. — Vol. 9. — P. 2792.
9. **Kuzkin V.** Unsteady ballistic heat transport in harmonic crystals with polyatomic unit cell / V. Kuzkin // *Continuum Mechanics and Thermodynamics*. — 2019. — Vol. 31, iss. 6. — P. 1573.
10. Two-temperature thermodynamic and kinetic properties of transition metals irradiated by femtosecond lasers / N. Inogamov [et al.] // *AIP Conference Proceedings*. — 2012. — Vol. 1464. — P. 593.
11. **Индейцев Д.** Двухтемпературная модель оптического возбуждения звука в проводниках / Д. Индейцев, Е. Осипова // *Доклады Академии наук*. — 2017. — Т. 473, вып. 2. — С. 154.
12. **Uribe F.** Two kinetic temperature description for shock waves / F. Uribe, R. Velasco, L. Garcia-Colin // *Physical Review E*. — 1998. — Vol. 58. — P. 3209.
13. **Kato A.** Breaking of equipartition in one-dimensional heat-conducting systems / A. Kato, D. Jou // *Physical Review E*. — 2001. — Vol. 64. — P. 052201.

14. **Kannan V.** Nonequilibrium stationary state of a harmonic crystal with alternating masses / V. Kannan, A. Dhar, J. Lebowitz // *Physical Review E*. — 2012. — Vol. 85. — P. 041118.
15. **Klein G.** Sur la mecanique statistique des phenomenes irreversibles III / G. Klein, I. Prigogine // *Physica*. — 1953. — Vol. 19. — P. 1053.
16. **Hemmer P.** Dynamic and stochastic types of motion in the linear chain / P. Hemmer. — Norway : Norges tekniske hoiskole, 1959.
17. **Lanford O.** Time evolution and ergodic properties of harmonic systems / O. Lanford, J. Lebowitz // *Lecture Notes in Physics*. — Berlin; Heidelberg; New York, 1975. — Vol. 38. — P. 144.
18. **Spohn H.** Stationary non-equilibrium states of infinite harmonic systems / H. Spohn, J. Lebowitz // *Communications in Mathematical Physics*. — 1977. — Vol. 54. — P. 97.
19. **Dudnikova T.** On the convergence to statistical equilibrium for harmonic crystals / T. Dudnikova, A. Komech, H. Spohn // *Journal of Mathematical Physics*. — 2003. — Vol. 44. — P. 2596.
20. **Allen M.** *Computer Simulation of Liquids* / M. Allen, D. Tildesley. — Oxford : Clarendon Press, 1987.
21. **Кривцов А.** Колебания энергий в одномерном кристалле / А. Кривцов // *Доклады Академии наук*. — 2014. — Т. 458, вып. 3. — С. 279.
22. **Slepyan L.** On the energy partition in oscillations and waves / L. Slepyan // *Proceedings of the Royal Society A*. — 2015. — Vol. 471. — P. 20140838.
23. **Babnikov M.** Energy oscillations in 1D harmonic crystal on elastic foundation / M. Babnikov, A. Krivtsov, D. Tsvetkov // *Physical Mesomechanics*. — 2016. — Vol. 19, iss. 1. — P. 60.
24. **Кузькин В.** Аналитическое описание переходных тепловых процессов в гармонических кристаллах / В. Кузькин, А. Кривцов // *Физика твердого тела*. — 2017. — Т. 59. — С. 1023.
25. **Кривцов А.** Распространение тепла в бесконечном одномерном гармоническом кристалле / А. Кривцов // *Доклады академии наук*. — 2015. — Т. 60. — С. 407.
26. **Prigogine I.** On the general theory of the approach to equilibrium / I. Prigogine, F. Henin // *Journal of Mathematical Physics*. — 1960. — Vol. 1. — P. 349.
27. **Kuzkin V.** Fast and slow thermal processes in harmonic scalar lattices / V. Kuzkin, A. Krivtsov // *Journal Physics: Condensed Matter*. — 2017. — Vol. 29. — P. 505401.
28. **Huerta M.** Exact equilibration of harmonically bound oscillator chains / M. Huerta, H. Robertson, J. Nearing // *Journal of Mathematical Physics*. — 1971. — Vol. 12. — P. 2305.

29. **Titulaer U.** Ergodic features of harmonic-oscillator systems / U. Titulaer // *Physica*. — 1973. — Vol. 70, iss. 2. — P. 257.
30. **Boldrighini C.** Convergence to stationary states for infinite harmonic systems / C. Boldrighini, A. Pellegrinotti, L. Triolo // *Journal of Statistical Physics*. — 1983. — Vol. 30, iss. 1. — P. 123.
31. One-dimensional harmonic lattice caricature of hydrodynamics / R. Dobreushin [et al.] // *Journal of Statistical Physics*. — 1986. — Vol. 43. — P. 423.
32. **Dudnikova T.** On the convergence to a statistical equilibrium in the crystal coupled to a scalar field / T. Dudnikova, A. Komech // *Russian Journal of Mathematical Physics*. — 2005. — Vol. 12 (3). — P. 301.
33. **Linn S.** Thermal energy transport in harmonic systems / S. Linn, H. Robertson // *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. — 1984. — Vol. 45 (2). — P. 133.
34. **Mielke A.** Macroscopic behavior of microscopic oscillations in harmonic lattices via Wigner-Husimi transforms / A. Mielke // *Archive of Rational Mechanics and Analysis*. — 2006. — Vol. 181. — P. 401.
35. **Кузькин В.** Высокочастотные тепловые процессы в гармонических кристаллах / В. Кузькин, А. Кривцов // *Доклады Академии наук*. — 2017. — Т. 472, вып. 5. — С. 1–5.
36. **Huerta M.** Entropy, information theory, and the approach to equilibrium of coupled harmonic oscillator systems / M. Huerta, M. Robertson // *Journal of Statistical Physics*. — 1969. — Vol. 1. — P. 393.
37. **Sokolov A.** Localized heat perturbation in harmonic 1D crystals: Solutions for an equation of anomalous heat conduction / A. Sokolov, A. Krivtsov, W. Muller // *Physical Mesomechanics*. — 2017. — Vol. 20, iss. 3. — P. 305.
38. **Гузов М.** Точная формула для температуры одномерного кристалла / М. Гузов // *Дальневосточный математический журнал*. — 2018. — Т. 18 (1). — С. 39.
39. **Schrödinger E.** Zur dynamik elastisch gekoppelter punktsysteme / E. Schrödinger // *Annalen der Physik*. — 1914. — Vol. 44. — P. 916.
40. **Rieder Z.** Properties of a harmonic crystal in a stationary nonequilibrium state / Z. Rieder, J. Lebowitz, E. Lieb // *Journal of Mathematical Physics*. — 1967. — Vol. 8. — P. 1073.
41. **Lepri S.** A stochastic model of anomalous heat transport: analytical solution of the steady state / S. Lepri, C. Mejia-Monasterio, A. Politi // *Journal of Physics A*. — 2008. — Vol. 42, iss. 2. — P. 025001.
42. **Lepri S.** Nonequilibrium dynamics of a stochastic model of anomalous heat transport / S. Lepri, C. Mejia-Monasterio, A. Politi // *Journal of Physics A*. — 2010. — Vol. 43. — P. 065002.

43. **Кривцов А.** Динамика тепловых процессов в одномерных гармонических кристаллах / А. Кривцов // Вопросы математической физики и прикладной математики: материалы семинара, приуроченного к 75-летию проф. Э. А. Троппа. — СПб. : Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе, 2016.
44. **Gavrilov S.** Heat transfer in a one-dimensional harmonic crystal in a viscous environment subjected to an external heat supply / S. Gavrilov, A. Krivtsov, D. Tsvetkov // Continuum Mechanics Thermodynamics. — 2019. — Vol. 31 (1). — P. 255.
45. **Kuzkin V.** Equilibration of kinetic temperatures in face-centered cubic lattice / V. Kuzkin, S. Liazhkov // Physical Review E. — 2020. — Vol. 102. — P. 042219.
46. **Kuzkin V.** Thermal equilibration in infinite harmonic crystals / V. Kuzkin // Continuum Mechanics and Thermodynamics. — 2019. — Vol. 31, iss. 5. — P. 1401.
47. **Berinskii I.** Equilibration of energies in a two-dimensional harmonic graphene lattice / I. Berinskii, V. Kuzkin // Philosophical Transactions of the Royal Society A. — 2019. — Vol. 378. — P. 2162.
48. **Кривцов А.** Теоретическая механика. Упругие свойства одноатомных и двухатомных кристаллов : учеб. пособие / А. Кривцов. — СПб. : Изд-во Политехн. ун-та, 2009.
49. Упругие и тепловые свойства идеальных кристаллов: учеб. пособие / И. Беринский [и др.]. — СПб. : Изд-во Политехн. ун-та, 2009.
50. Механические свойства ковалентных кристаллов: учеб. пособие / И. Беринский [и др.]. — СПб. : Изд-во Политехн. ун-та, 2014.
51. **Кривцов А.** Механика дискретных сред. Переходные тепловые процессы в гармонических кристаллах: учеб. пособие / А. Кривцов, В. Кузькин. — СПб. : Изд-во Политехн. ун-та, 2018.
52. **Кривцов А.** Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой / А. Кривцов. — М. : Физматлит, 2007.
53. **Кузькин В.** Перенос энергии в упругих твердых телах с кристаллической структурой : учеб. пособие / В. Кузькин, А. Кривцов, С. Щербинин. — СПб. : Изд-во Политехн. ун-та, 2024.
54. Propagation of Slepyan's crack in a non-uniform elastic lattice / M. Nieves [et al.] // Journal of Mechanics and Physics of Solids. — 2013. — Vol. 61, iss. 6. — P. 1464.
55. **Индейцев Д.** Корреляция между свойствами частот и форм свободных колебаний твердотельной цепочки с моментными связями / Д. Индейцев, А. Сергеев // Вестник Санкт-Петербургского университета. Сер. 1. Математика. Механика. Астрономия. — 2017. — Т. 4 (62), вып. 2.

56. **Murachev A.** Thermal echo in a finite one-dimensional harmonic crystal / A. Murachev, A. Krivtsov, D. Tsvetkov // Journal of Physics: Condensed Matter. — 2019. — Vol. 31, iss. 9. — P. 095702.
57. **Wong R.** Asymptotic approximations of integrals / R. Wong. — Academic Press, 1989.
58. **Krivtsov A.** Dynamics of matter and energy / A. Krivtsov // ZAMM - Journal of Applied Mathematics and Mechanics / Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik. — 2023. — Vol. 103, no. 4. — e202100496.
59. **Dove M.** Introduction to lattice dynamics / M. Dove. — London : Cambridge University Press, 1993.
60. **Fedoryuk M.** The stationary phase method and pseudodifferential operators / M. Fedoryuk // Russian Mathematical Survey. — 1971. — Vol. 26. — P. 65.
61. **Kosevich A.** The crystal lattice: phonons, solitons, dislocations, superlattices / A. Kosevich. — Weinheim : John Wiley & Sons, 2006.
62. **Simon S.** The Oxford solid state basics / S. Simon. — Oxford : Oxford University Press, 2013.
63. **Tsaplin V.** Temperature oscillations in harmonic triangular lattice with random initial velocities / V. Tsaplin, V. Kuzkin // Letters on Materials. — 2018. — Vol. 8 (1). — P. 16.
64. **Кривцов А.** Вывод уравнений состояния идеальных кристаллов простой структуры / А. Кривцов, В. Кузькин // Известия РАН. Механика твердого тела. — 2011. — Т. 46, вып. 3. — С. 387—399.
65. **Панченко А.** Анализ уравнения состояния и определение функции Грюнайзена для двумерных кристаллических решеток / А. Панченко, Е. Подольская, А. Кривцов // Доклады Академии наук. — 2017. — Т. 473, вып. 2. — С. 159.
66. **Gavrilov S.** Thermal equilibration in a one-dimensional damped harmonic crystal / S. Gavrilov, A. Krivtsov // Physical Review E. — 2019. — Vol. 100. — P. 022117.
67. **Krivtsov A.** Transient diffusion and thermal processes in a finite one-dimensional harmonic crystal / A. Krivtsov, A. Murachev, D. Tsvetkov // Journal of Physics Condensed Matter. — 2022. — Vol. 34 (9). — P. 095401.

Кузькин Виталий Андреевич
Кривцов Антон Мирославович
Щербинин Степан Александрович

ПЕРЕХОДНЫЕ ПРОЦЕССЫ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ С КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРОЙ

Учебное пособие

Редактор *Л. В. Ларионова*
Корректор *Н. Б. Цветкова*
Оригинал-макет подготовлен авторами
Дизайн обложки *Е. В. Гладышевой*

Санитарно-эпидемиологическое заключение
№78.01.07.953 П.001342.01.07 от 24.01.2007 г.

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

Подписано в печать 05.10.2023. Формат 60x84/16.
Усл. печ. л. 5,0. Тираж 100. Заказ xxxx.

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