Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого

Институт прикладной математики и механики

| « | >> | 2021 г. |
|----------|-----------------|-------------------|
| | | А.М. Кривцов |
| Ди | ректо | р высшей школы |
| Pa | бота д | цопущена к защите |

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА

магистерская диссертация

РАСПРОСТРАНЕНИЕ ТЕПЛА В БЕСКОНЕЧНОМ ОДНОМЕРНОМ КРИСТАЛЛЕ С УЧЁТОМ N-ОЙ КООРДИНАЦИОННОЙ СФЕРЫ

по направлению подготовки 01.04.03 Механика и математическое моделирование

Направленность 01.04.03_02 Механика и математическое моделирование (международная образовательная программа)

Выполнил

студент гр. 3640103/90201

Р. В. Рубинова

Руководитель

доцент ВШТМ, к. ф-м. н.

О. С. Лобода

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ ПЕТРА ВЕЛИКОГО Институт прикладной математики и механики

УТВЕРЖДАЮ
Директор
Высшей школы теоретической механики
А.М.Кривцов
« » 2021 г.

ЗАДАНИЕ

по выполнению выпускной квалификационной работы

студенту <u>Рубиновой Раисе Витальевне, группа 3640103/90201</u> фамилия, имя, отчество (при наличии), номер группы

- 1. Тема работы: Распространение тепла в бесконечном одномерном кристалле с учётом N-ой координационной сферы
- 2. Срок сдачи студентом законченной работы: <u>07.06.2021</u>
- 3. Исходные данные по работе: <u>модель Борна-вон-Кармана для описания динамики кристаллической решётки</u>, работы исследователей различных научных школ с более простыми моделями, основные параметры рассматриваемых систем
- 4. Содержание работы (перечень подлежащих разработке вопросов): <u>определение дисперсионных соотношений и групповых скоростей, построение приближённого фундаментального решения задачи теплопереноса, анализ количества тепловых волн, распространяющихся в кристалле, их скоростей и коэффициентов интенсивности как функции вариативного параметра системы; построение численного решения интеграла распределения температуры</u>
- 5. Перечень графического материала (с указанием обязательных чертежей): визуализации математической модели гармонического одномерного кристалла с учётом первой, второй и третей координационных сфер, визуализация двухатомной кристаллической решётки, результаты анализа кристалла с учётом второй координационной сферы, графики дисперсионных соотношений для кристалла с учётом третей и N-ой координационных сфер, графики групповых скоростей, для кристалла с учётом третей и N-ой координационных сфер графики максимальных значений частоты как зависимость от номера координационной сферы, графики глобальных максимумов групповых скоростей для кристалла с учётом третей и N-ой координационных сфер как зависимость параметров системы, графики скоростей различных волн, распространяющихся в кристалле с учётом третей координационной сферы как срезы зависимостей от одного из двух параметров, визуальный анализ распространения волн в кристалле с учётом третей координационной сферы, графики численного решения задачи о распространении тепла при прямоугольном начальном возмущении для кристалла с учётом третей и N-ой координационных сфер, график фундаментального решения задачи нестационарного теплопереноса при различных номерах координационной сферы, график

| предельного случая фундаментального решения, график а | мплитуды волн как функции номера ко- |
|---|--|
| ординационной сферы | |
| 6. Консультанты по работе: Лобода Ольга Сергеевна | |
| 7. Дата выдачи задания 25.01.2021 | |
| Руководитель ВКР | <u>О. С. Лобода</u> инициалы, фамилия |
| Задание принял к исполнению <u>25.01.2021</u> _(дата) | |
| Студент | <u> Р. В. Рубинова</u> |
| (подпись) | инициалы, фамилия |

РЕФЕРАТ

На 79 с., 28 рисунков, 1 таблица, 1 приложение

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: ГАРМОНИЧЕСКИЙ КРИСТАЛЛ, N-АЯ КООРДИНАЦИОННАЯ СФЕРА, НЕСТАЦИОНАРНЫЕ ТЕПЛОВЫЕ ПРОЦЕССЫ, ТЕПЛОВЫЕ ВОЛНЫ, ФУНДАМЕНТАЛЬНОЕ РЕШЕНИЕ

Тема выпускной квалификационной работы: «Распространение тепла в бесконечном одномерном кристалле с учётом N-ой координационной сферы».

Данная работа посвящена исследованию характера распространения тепловых волн в одномерном одноатомном бесконечном кристалле, поведение которого описывается гармонической моделью Борна-вон-Кармана.

В работе исследовано две различные системы. Во-первых, рассмотрена кристаллическая решётка с учётом взаимодействий с третьей координационной сферой с вариативными жёсткостями связи. Во-вторых, проведён анализ кристалла с вариативным номером координационной сферы и жёсткостью связи, фиксированным образом зависящей от номера соседа. В ходе работы решались следующие задачи:

- 1. Построение дисперсионных соотношений и групповых скоростей, характеризующих волны, способные распространяться в среде с заданной конфигурацией.
- 2. Построение приближённого фундаментального решения задачи нестационарного теплопереноса, определение амплитуды волны в области фронта.
- 3. Построение численного интеграла температуры.

Методология проведения выпускной квалификационной работы включала в себя методы сравнительного анализа литературы и обобщения для работы с теорией; построение математической модели как основной метод работы; численное моделирование, а также методы сопоставления в заключительной части.

В результате работы был проанализирован характер распространения тепловых волн в кристаллических структурах заданной конфигурации. Было определено, что количество волн, распространяющихся в кристалле, соответствует номеру координационной сферы. Также было получено, что при увеличении скорости волны её коэффициент интенсивности уменьшается.

ABSTRACT

79 pages, 28 figures, 1 table, 1 appendix

KEYWORDS: HARMONIC CRYSTAL, N-TH COORDINATION SPHERE, UNSTATIONARY HEAT PROCESSES, HEAT WAVES, FUNDAMENTAL SOLUTION

The subject of the graduate qualification work is "Heat propagation in one-dimensional infinite crystal considering the N-th coordination sphere".

This work is devoted to studying the characteristics of the heat wave propagation in one-dimensional monoatomic infinite crystal under the harmonic Born-von-Karman model.

Two systems are considered in the work. First system is with respect to the third coordination sphere with variative connection stiffnesses. Second model takes into the account the N-th coordination sphere with stiffnesses depending on the number of the neighbour with which the interaction is considered. The research sets the following goals:

- 1. Construction of dispersion curves and group velocities characterising the waves propagating in the crystal with a certain configuration.
- 2. Construction of fundamental solution to the nonstationary heat conductivity problem and intensity of the heat waves in the vicinity of the wave front.
- 3. Construction of numerical solution.

Methodology of the graduate qualification work includes the comparative analysis and generalization as well as mathematical modelling and implementation of numerical algorithms.

The study resulted into analysis of the nature of heat wave propagation in crystal structures of defined configurations. It was proved that the number of waves propagating in the crystal corresponds to the number of the coordination spheres considered. Another outcome is that the increase in wave velocity causes the decrease in the wave intensity.

СОДЕРЖАНИЕ

| ВВЕДЕНИЕ | 5 |
|---|----|
| ГЛАВА 1. ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ТЕПЛОВОЙ ВОЛНЫ В КРИСТАЛЛЕ | 8 |
| 1.1. Понятие кристалла. Его виды и области применения | 8 |
| 1.2. Теория совершенной структуры для описания колебаний в идеальном кристалле | 15 |
| 1.3. Гармонический кристалл, модель Борна-фон-Кармана | |
| 1.4. Тепловые процессы в кристалле | |
| 1.5. Постановка задачи | |
| ГЛАВА 2. РАСПРОСТРАНЕНИЕ ТЕПЛА В КРИСТАЛЛЕ С ТРЕТЬЕЙ КООРДИНАЦИОННОЙ СФЕРОЙ С ВАРИАТИВНЫМИ ЖЁСТКОСТЯМИ. | |
| 2.1. Дисперсионное соотношение и групповая скорость | 39 |
| 2.2. Фундаментальное решение задачи о распространении тепла в кристалл | |
| 2.3. Численное решение задачи о распространении тепла в кристалле | |
| ГЛАВА 3. РАСПРОСТРАНЕНИЕ ТЕПЛА В КРИСТАЛЛЕ С ВАРИАТИВНО КООРДИНАЦИОННОЙ СФЕРОЙ С ФИКСИРОВАННЫМИ ЖЁСТКОСТЯМ | ΜИ |
| 3.1. Дисперсионное соотношение и групповая скорость | |
| 3.2. Фундаментальное решение задачи о распространении тепла в кристалл | |
| 3.3. Численное решение задачи о распространении тепла в кристалле | 69 |
| ЗАКЛЮЧЕНИЕ | 71 |
| СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ | 74 |
| ПРИЛОЖЕНИЕ А. Анализ методов количественного описания колебаний вокруг положений равновесия в идеальном кристалле | 78 |

ВВЕДЕНИЕ

С расширением области применения наноструктур возросла актуальность исследований процессов теплообмена на микроуровне. Его корректное описание возможно в том случае, когда установлена связь между микро- и макроскопическим поведением твёрдого тела. Одним из наиболее удобных инструментов является динамика кристаллической решётки [14, 15]. На данный момент аналитический анализ нестационарных тепловых процессов на молекулярном уровне существует только для ограниченного класса систем, одним из которых является класс гармонических одномерных кристаллов. В этой области на протяжении последних лет был достигнут значительный прогресс, что иллюстрируют работы [5, 22, 26–31, 36].

В макросистемах с диффузионным характером распространения тепла процессы теплообмена могут быть с высокой точностью описаны законом Фурье. Однако на микро- и наноуровне данный закон даёт большие отклонения от экспериментальных результатов, что обосновывается баллистическим характером теплообмена. Описание тепловых процессов через модель идеального гармонического кристалла удовлетворяет эмпирическим данным [5, 31].

Для описания тепловых процессов в кристалле может быть использован подход, подробно изложенный в работе [13]. Рассматривается бесконечное множество одинаковых систем со случайными начальными условиями и используются статистические характеристики, одной из которых является кинетическая температура. Результатом исследований [12–13, 22, 28–31] является аналитическое описание температуры в гармоническом кристалле.

Важным направлением исследования является изучение влияния полиатомности или взаимодействий с дальними соседями на процессы в дискретных средах. В работах [16, 32–33, 35] был проведён анализ дисперсионных характеристик, групповых скоростей и интенсивностей фронта для задачи двухатомной цепочки с чередующимися массами и модели

одноатомной цепочки с учётом взаимодействия со второй координационной сферой.

Объектом исследования данной выпускной квалификационной работы является одноатомный одномерный бесконечный кристалл без дефектов в гармоническом приближении, описываемый моделью Борна-фон-Кармана (квазиупругие силы взаимодействия). Предмет исследования — нестационарные тепловые процессы, распространение тепловых волн в исследуемой кристаллической структуре.

Цель выпускной квалификационной работы состоит в определении функциональной зависимости (качественной или количественной) характера распространения тепловых волн (характера протекания нестационарных тепловых процессов) в кристалле с заданной конфигурацией от значения вариативного параметра системы.

Для достижения цели исследования был поставлен следующий ряд задач. Для каждой из двух рассмотренных систем:

- Построить дисперсионные соотношения и групповые скорости, характерные для исследуемой структуры и проанализировать характер их изменения;
- Построить фундаментальное решение задачи теплопереноса;
- Проанализировать количество тепловых волн, распространяющихся в кристалле, их скорости и коэффициенты интенсивности как функции вариативного параметра системы;
- Построить численное решение и подтвердить или опровергнуть гипотезы, сформулированные при аналитическом анализе процесса распространения тепла.

Поставленные цель и задачи исследования определили логику и структуру выпускной квалификационной работы. Она состоит из введения, трёх глав, заключения и библиографического списка.

Во введении раскрывается степень разработанности и актуальность проблемы, формулируются цель и задачи дипломного проекта.

В первой главе «Теоретические аспекты моделирования распространения тепловой волны в кристалле» раскрываются теоретические и методические основы решения задачи нестационарного теплопереноса в кристаллической структуре. Рассматривается понятие кристалла, области его применения в современной науке и промышленности; приводятся модели, используемые для работы с кристаллическими структурами, и анализируются модели и задачи, уже используемые в науке. Тем самым определяется место данной работы в развитии данного направления, а также вырабатывается алгоритм исследования.

Во второй главе «Распространение тепла в кристалле с третьей координационной сферой с вариативными жёсткостями» решается задача о распространении тепла в одномерной кристаллической решётке, в которой каждый атом связан с шестью ближайшими к нему соседями. Выполняется параметризация, и исследуются дисперсионные соотношения и групповые скорости волн в системе как функции введённых параметров. На основе полученных данных и теории находится фундаментальное решение, и делаются выводы о количестве и характере волн, распространяющихся в кристалле.

В третьей главе «Распространение тепла в кристалле с вариативной координационной сферой с фиксированными жёсткостями» приводится решение задачи для одномерной кристаллической решётки со сколь угодным количеством взаимодействий. Как и во второй главе проводится анализ характеристик тепловых волн, распространяющихся в кристалле. Проводится сравнение аналитических результатов с результатами численного моделирования.

В заключении сформулированы основные результаты проведённого исследования для обеих рассмотренных задач.

ГЛАВА 1. ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ТЕПЛОВОЙ ВОЛНЫ В КРИСТАЛЛЕ

1.1. Понятие кристалла. Его виды и области применения

Чтобы понятие «кристалл», дадим сначала определение В наиболее общем, кристаллической решётки. трёхмерном случае, кристаллическая решётка — это неограниченное множество точек в пространстве, для которого может быть определена некомпланарная тройка векторов, такая, что смещение этого множества на любой из них является тождественным преобразованием [14]. Иными словами, это множество точек, имеющее периодическую характеризуемую элементарной ячейкой структуру, параллелепипедом, построенным на трёх векторах. Кристалл представляет собой совокупность равновесном состоянии образуют частиц, которые кристаллическую решётку.

Отличительной особенностью кристаллов является наличие сильных взаимодействий между атомами или молекулами, являющимися их компонентами. В результате этого в кристалле наблюдаются лишь малые колебания вокруг положений равновесия частиц, в то время как в жидкостях и газах молекулы или атомы могут перемещаться на расстояния, соразмерные межатомным расстояниям, или превышающие их. Более того, кристалл, при условии отсутствия внешних воздействий, сохраняет свою форму, объём и характеристики.

Кристаллы имеют сложную структуру и характер взаимодействия частиц – ближний или дальний [8]. Ближний порядок предполагает взаимодействие частицы с соседями, находящимися в непосредственной близости. Он характерен не только для кристаллов, но и для жидких и газообразных веществ. Примером кристалла с ближним порядком являются аморфные твёрдые тела. Дальний порядок рассматривает взаимодействие частицы с иными атомами или молекулами, находящимися в кристаллической решётке далеко.

Большинство поликомпонентных кристаллов представляют собой систему взаимосвязанных ионов, поэтому выделяют следующие силы взаимодействия, определяющие динамику частиц в кристаллах:

- Кулоновские силы;
- Силы Ван-дер-Вальса;
- Отталкивающие силы ближнего порядка.

Кулоновские силы представляют собой силы дальнего порядка и описывают притяжение или отталкивание двух ионов [4]. Они выражаются следующей формулой:

$$U = -k \frac{q_1 q_2}{r} \tag{1}$$

где q_i — величина заряда иона, r — расстояние между ионами, k — коэффициент пропорциональности, зависящий от выбранной системы измерения. В системе СИ $k=8.988~{\rm H\cdot m^2/Kn^2}$.

Силы Ван-дер-Ваальса (молекулярные силы) — силы притяжения между двумя атомами или молекулами, связанные с наличием у каждого атома флуктуирующего дипольного момента [24]. Они характеризуются энергией диполь-дипольного взаимодействия:

$$U = -\frac{|p_1||p_2|}{4\pi\epsilon_0 r^3} = -\frac{|p_1|^2 \chi}{(4\pi\epsilon_0 r^3)^2}$$
 (2)

где $|p_1|$ — скалярное значение дипольного момента атомов, χ — диэлектрическая восприимчивость, r — расстояние между двумя атомами или молекулами, а ϵ_0 — диэлектрическая постоянная.

Примером кристаллов, в которых силы Ван-дер-Ваальса являются доминирующими, являются кристаллы с инертными атомами и молекулярными соединениями.

Отталкивающие силы ближнего порядка возникают в атомах из-за перекрытия их электронных оболочек. Так как данное явление возможно только

при переходе к более высоким квантовым состояниям электронов, для чего требуется дополнительная энергия, атомы начинают взаимно отталкиваться. Эмпирический анализ показал, что силы отталкивания хорошо описываются законом вида $\frac{Const}{r^{12}}$.

Некоторые исследователи предпочитают объединять силы притяжения Ван-дер-Ваальса и силы отталкивания в единый потенциал: потенциал Леннарда-Джонса:

$$U(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{6} \right]$$
 (3)

Легко определить, какие силы играют какую роль при рассмотрении взаимодействий компонент кристалла с разными соседями. При исследовании ближнего порядка велики силы Ван-дер-Ваальса и отталкивающие силы, возникающие в результате наложения электронных облаков. Они, однако, быстро убывают и не играют практически никакой роли при рассмотрении соседей, отличных от ближних. Кулоновское взаимодействие убывает медленней, поэтому существенно при изучении дальнего порядка взаимодействий. При исследовании взаимодействия ближайших соседей оно существенно меньше, чем притяжение Ван-дер-Ваальса.

Безусловно, стоит отметить, что величина силы взаимодействий зависит от плотности упаковки кристалла и от химических параметров системы. Но при сравнении их друг с другом описанные выше характеристики сохраняются для большинства кристаллов.

Кристаллы можно классифицировать по широкому перечню признаков, связанных с химическими, геометрическими и другими параметрами вещества. Одна из основных классификаций — по типу связи между составляющими кристалл частицами. Выделяют [9, 14]:

- Ионные кристаллы;
- Ковалентные;

- Металлические;
- Молекулярные;
- С водородными связями.

каждый Охарактеризуем Ионные кратко ИЗ типов. кристаллы представляют собой соединения электроположительных сильно электроотрицательных элементов (например, хлорид натрия NaCl). При образовании ионной связи электрон от электроотрицательного атома переходит к атому электроположительного, что приводит к образованию крепкой связи, которую сложно разрушить. Атомы данного типа отличаются высокой прочностью.

Наиболее ярким примером ковалентного кристалла является алмаз. В кристаллах подобного типа образуется общее электронное облако для каждой пары атомов, в результате чего между ними образуется зона повышенной электронной плотности и направленная связь. В некоторых случаях с химической точки зрения ковалентные кристаллы можно рассматривать как одну гигантскую молекулу. В случае ковалентных кристаллов можно рассматривать классическое кулоновское взаимодействие между атомами.

Стоит отметить, что есть ряд двухатомных кристаллов, которые занимают промежуточную позицию в классификации: кристаллы с ионной и частично ковалентной связью. Примером такого кристалла является оксид цинка.

Металлические кристаллы представляют собой кристаллы, сформированные из атомов металла. Их отличительной особенностью являются высокая электропроводность и коэффициент отражения света. При этом, однако, они обладают слабой межатомной связью, так как представляют собой систему правильно расположенных положительных зарядов, погружённых в однородную электронную жидкость.

Если единицей кристалла является не атом, а молекула, силой связи являются слабые силы Ван-дер-Ваальса. Такие структуры носят название молекулярных [8] или Ван-дер-Ваальсовых кристаллов [14]. Из-за слабого

характера данных сил молекулярные кристаллы имеют низкие температуры плавления.

Наконец, выделяют кристаллы с водородными связями, которые образуются за счёт малого размера водорода и большой электроотрицательности протона. Водородная связь встречается в белковых молекулах и является ключевым признаком, влияющим на формирование их пространственной геометрической структуры.

Помимо классификации кристаллов с точки зрения химической связи между молекулами или атомами (которая, в свою очередь, зависит от типа атомов в кристалле), можно выделить типы кристаллов и по другим признакам. В частности, мы можем говорить об одномерных, двумерных или трёхмерных кристаллах. Все три вида активно применяются в современном производстве, а также используются в науке. Для трёхмерных кристаллов существует также классификация, связанная с типом симметрии кристалла, однако в данной работе она приводится не будет, так как трёхмерные кристаллы в ней не рассматриваются.

Кристаллы также делят на:

- Натуральные (например, алмаз, добываемый в шахтах, и т. д.);
- Синтетические (выращиваемые в лабораториях и на производстве).

Помимо этого, существуют искусственные материалы или структуры, строение которых аналогично строению кристаллической решётки, но которые имеют больший масштаб [21]. Примером такой структуры могут стать композитные материалы.

Наиболее распространённый тип формирования кристаллов — выращивание их из растворов или расплавов. По мере остывания раствора или испарения растворителя происходит перенасыщение, в результате которого лишнее вещество выпадает в виде кристаллов. Примером естественного процесса кристаллизации подобным методом является образование соли в

заливе Кара-Богаз-Гол на Каспийском море. Другими типами кристаллизации являются переходы твёрдая фаза — кристалл и газ — кристалл.

Помимо выращивания кристаллов из растворов, существует также однокомпонентная и поликомпонентная кристаллизации. Последняя является наиболее распространённой, в связи с простотой её реализации.

Одним из самых распространённых методов синтетического выращивания кристаллов является метод Чохральского — медленного вытягивания из расплава кристалла по мере его роста. Данный метод отличается низкой дефектностью и позволяет вырастить монокристаллы в строго контролируемых условиях. Он применяется при выращивании полупроводниковых кристаллов с высокой температурой плавления.

Поговорим теперь об области применения. Кристаллическая структура встречается практически повсеместно. Как уже говорилось выше, большинство твёрдых тел имеют форму кристаллов. Из-за обширности класса веществ с кристаллической структурой кратко описать область применения кристаллов сложно. Приведём наиболее распространённые и интересные для науки и производства примеры.

Когда кто-то произносит слово «кристалл», на ум, в первую очередь, приходит алмаз. Он имеет высокое количество промышленных способов применения [23, 26]:

- Режущее, абразивное и буровое оборудование (например, добыча полезных ископаемых, в том числе при добыче нефти и газа);
- Оптика;
- Полупроводниковая электроника на алмазе (алмазные транзисторы, детекторы ионизирующих излучений на алмазе);
- Электронные приборы на монокристаллических алмазных пластинах;
- Теплоотводы из поликристаллических алмазных плёнок;

- СВЧ реакторы и многие другие.

Многие кристаллы используются в тех же областях, что и алмаз. Например, корунд используется для изготовления абразивного оборудования [20].

Широко применяются кристаллы в оптике и электронике. В этих областях выделяют два специальных класса кристаллов: фононные и фотонные. Фононные кристаллы представляют собой периодические композиты из двух материалов с достаточным акустическим контрастом [19]. Основной принцип действия материалов с данной структурой заключается в существовании запрещённых зон — частот акустических волн, которые не могут распространяться в данной среде. Это приводит к тому, что при падении акустической волны данной частоты на кристалл, она рассеивается.

Фононные кристаллы могут быть использованы для создания различных сенсорных датчиков, например датчиков детектирования объёмных свойств жидкости. Для разработки такой системы необходимо иметь представление о характере распространения волн в фононном кристалле.

Фотонный кристалл — макроскопическая периодическая структура, состоящая из двух чередующихся в пространстве диэлектриков с различными диэлектрическими постоянными [10]. Одномерные фотонные кристаллы используются как тонкопленочные оптические фильтры или как планарные отражательные решетки интегральных устройств оптоэлектроники. Данные структуры широко применяются в оптических и СВЧ-элементах [21].

При добавлении дефектов в периодическую решётку фотонного сигнала, как и в случае с фононами, возможно создание запрещённых зон. Данное явление может быть применено в узкополосных спектральных фильтрах, низкопороговых лазерах и высокоэффективных нелинейно-оптических преобразователях [6].

Отметим, что помимо использования кристаллических структур в лабораториях и в промышленности, кристаллы могут быть использованы и в других, более повседневных и менее научных областях, например, в кондитерской промышленности. Также кристаллические формы применяются в фармакологии, медицине, косметологии и многих других направлениях.

B зависимости OT области применения анализ характеристик кристаллической структуры будет носить разный характер. В этой работе рассматривается анализ тепловых характеристик кристалла, в частности, волн. Знание распространения тепловых температурного распределения играет важную роль, так как существуют свойства твёрдых веществ, зависящие от температуры: магнетическая или диэлектрическая Понимание постоянная, точки фазового перехода И T. Д. распространения тепла в кристалле важно, например, для управления спектральными характеристиками фотонных и фононных кристаллов.

Существует два глобальных подхода к описанию кристалла и его поведения [2]: теории совершенной и несовершенной структур. В то время как вторая позволяет охарактеризовать такие явления как деформационное поведение и упрочнение и структурные изменения, теория совершенной структуры удовлетворительно истолковывает основные упругие свойства кристаллов, их электро- и теплопроводность. Поэтому в данной работе был использован подход идеальной структуры и рассмотрен идеальный кристалл.

1.2. Теория совершенной структуры для описания колебаний в идеальном кристалле

Теория идеальной структуры предполагает рассмотрение твёрдого кристаллического вещества в виде решётки, узлами которой являются атомы кристалла. Физические свойства вещества зависят от особенности динамики частиц, образующих решётку. На протяжении всего периода изучения

кристаллов посредством их замены данной моделью был построен ряд теорий, среди наиболее распространённых из них [38]:

- Метод силовых постоянных;
- Модель Борна-фон-Кармана;
- Модель жёстких ионов;
- Модель оболочек;
- Теория функционала плотности;

Наиболее общий и оттого традиционный подход к вычислению нормальных мод и частот колебаний решётки (которые, в свою очередь, позволяют оценить характер поведения кристалла) – метод силовых постоянных [25]. Основное предположение, на который опирается данный метод, заключается в том, что полную энергию системы можно представить в виде функции координат всех её компонент. При колебании происходит малое отклонение частиц (атомов) от положений равновесия, и энергия представляется разложением в ряд Тейлора по малым смещениям частиц из положений равновесия:

$$E_{tot} = W(\underline{r}_1, \underline{r}_2, \dots \underline{r}_n) + \sum_{i} \frac{\delta W}{\delta \underline{r}_i} \delta \underline{r}_i + \sum_{i,j} \delta \underline{r}_i \frac{\delta^2 W}{\delta \underline{r}_i \delta \underline{r}_j} \delta \underline{r}_j \dots$$
(4)

По условию положения равновесия первые производные потенциала равны нулю, в результате чего энергия системы с точностью до константы описывается членами второго порядка. Вторая производная потенциала по смещению носит название матрицы взаимодействия и характеризует силы, действующие на частицу со стороны других. Можно записать уравнение динамики каждого атома с учётом того, что отклонение от положения равновесия имеет экспоненциальную зависимость от частоты колебаний:

$$-m\omega^2 \underline{u} = -\sum_j \frac{\delta^2 W}{\delta \underline{r}_i \delta \underline{r}_i} \underline{u} e^{i\underline{k} \cdot (\underline{r}_j - \underline{r}_i)}$$
 (5)

Отметим, что данное выражение описывает трёхмерную систему. Решение задачи о колебаниях в кристалле заключается в численном отыскании компонент

матрицы взаимодействия и последующем решение системы уравнений. Основная сложность заключается, однако, в вычислении данных компонент.

Для упрощения метода может использоваться допущение, что частицы системы взаимодействуют только с ближайшими соседями. Однако это не всегда является верным, а потому результаты могут иметь погрешность. Существует ряд поправок данного метода, учитывающих до семи координационных сфер. Можно говорить о том, что метод силовых постоянных является основополагающим, а остальные методы есть его модификации. Более того, он полезен при необходимости проведения качественного анализа колебаний кристаллической решётки.

Модель Борна-фон-Кармана по сей день является наиболее распространённой. Её суть заключается в представлении кристаллической решётки в виде системы точечных масс, связанных между собой пружинами. Тогда силы взаимодействия между частицами подчиняются закону Гука, и динамика частицы описывается посредством уравнения баланса (т. е. вторым законом Ньютона). Такое представление также называют гармоническим приближением. Данная модель позволяет анализировать движение частиц вокруг своих положений равновесий для моделей разной пространственной сложности, начиная с одномерных и заканчивая трёхмерными.

Большим преимущество данной модели является возможное усложнение системы, которое, однако, не сказывается на методах, используемых для описания. В частности, возможно рассматривать периодические кристаллы, состоящие из частиц разной массы, чередующихся друг с другом, связанных разными пружинами. Более того, может быть рассмотрен случай, когда частицы связаны не только с ближайшими соседями, т. е. рассмотрены взаимодействия дальнего порядка. При этом теоретический подход к описанию поведения системы позволяет не просто получить результаты, точно описывающие кристалл, но и понять влияние того или иного параметра структуры на исследуемые физические свойства.

Однако у данной модели есть и свои ограничения. Во-первых, размер частиц, из которых состоит атом, должен быть существенно меньше расстояния между ними. Отклонение частицы от положения равновесия также должно быть значительно меньше межатомных расстояний. В связи с этим данный подход может давать большие ошибки при температурах, близких к точке плавления кристалла.

Во-вторых, для применения данного подхода на практике необходимо определить жёсткости абстрактных пружин, которыми в данной модели связаны частицы. Это можно сделать, если определить реальные силы, действующие на атомы или молекулы в кристалле, и найти такую жёсткость, чтобы в определённой области упругая сила была равна реальным.

Методом, которые более подробно рассматривают природу и характер взаимодействий в кристалле, является, например, модель жёстких ионов. Модель жёстких ионов (rigid ion model), как можно понять из названия, рассматривает кристалл как систему единичных клеток, заполненных ионами [39]. Данный метод был введён для изучения свойств конечных или полубесконечных кристаллов, поведение волн в которых существенно зависит от характера взаимодействий на границе (границах). Данный метод в различных вариациях позволил получить единую модель для описания подобных систем.

Между ионами рассматривается несколько видов взаимодействий: взаимодействия ближнего порядка (иначе говоря, взаимодействия между ближайшими и, в некоторых случаях, вторыми соседями) и Кулоновские взаимодействия, учитывающие влияние ионов, не находящихся непосредственно вблизи. Второй тип сил, действующих на каждый ион, представляет собой сходящуюся сумму экспоненциально убывающих слагаемых — сил взаимодействия со всеми ионами, не входящими непосредственно в ближний круг рассматриваемого иона.

Одно из основных ограничений данной модели связано со вторым типом взаимодействий. Оценки, которые позволяют представить влияние дальних

ионов на рассматриваемый в виде сходящегося ряда, не могут быть применены при больших длинах распространяющихся волн. Более того, предполагается, что величина Кулоновских взаимодействий убывает быстро, что не является справедливым допущением для всех систем.

Для непосредственной оценки мод колебаний в кристалле при использовании метода жёстких ионов численно решается уравнение движения. Несмотря на то, что данная модель обеспечивает удовлетворительную точность и позволяет оценить характер поведения волны в кристалле конкретного типа, она не всегда подходит для теоретического описания задачи распространения волн в кристалле. Помимо этого, данная модель не может правильно оценить диэлектрические константы кристалла при полях высокой частоты, что связано с поляризаций ионов.

Уточнением модели жёстких ионов стала модель оболочек [34]. Делается предположение, что внешние электроны иона образуют оболочку, которая может двигаться вокруг равновесного положения относительно центра иона без деформаций. Смещение отрицательно заряженной оболочки относительно положительного ядра создаёт дипольный момент, который характеризует искажение иона в реальной системе.

В этом случае силы дальнего порядка характеризуются Кулоновскими взаимодействиями, а силы ближнего порядка могут быть найдены как силы связи оболочки с ядром. Эти силы позволяют определить силовые константы.

Наиболее молодым методом исследования динамики кристаллической системы является теория функционала плотности (DFT). Данная теория нашла широкое применение во многих областях науки, особенно с появлением мощных вычислительных компьютеров. Согласно основным постулатам теории [36], общая энергия может быть единственным образом определена как функция электронной плотности n(r) (функция координаты):

$$E_{KS} = T_S[n] + E_{ext}[n] + E_H[n] + E_{xc}[n] + E_{ion-ion}$$
 (6)

где T_s — кинетическая энергия не взаимодействующих между собой электронов, E_{ext} — энергия взаимодействия электронов с ядром атома, E_H — энергия Хартри (электрическая потенциальная энергия атома водорода в основном состоянии), E_{xc} — энергия, описывающая обмен энергией внутри системы и $E_{ion-ion}$ — отталкивающая энергия связи между ионами. Выражение (6) представляет собой функционал, который минимизируется с условием сохранения количества электронов в системе:

$$\frac{\delta}{\delta n} \left[E_{KS} - \frac{\delta E_{KS}}{\delta n} \left(\int n(\underline{r}) d\underline{r} - N_e \right) \right] = 0 \tag{7}$$

Уравнение (7) приводит к уравнениям динамики частиц. В численном виде оно сводится к представлению состояний каждой частицы в виде линейной комбинации набора базисных функций:

$$\psi_i(\underline{r}) = \sum_{\mu} C_{\mu i} \chi_{\mu}(\underline{r}) \tag{8}$$

и общая энергия системы может быть представлена в следующем виде:

$$E_{tot} = E_{KS}[n_0(\underline{r})] = \min_{C_{vi}} [E_{KS} - \sum_i f(\epsilon_i) \epsilon_i (\langle \psi_i | \psi_i \rangle - 1)]$$
 (9)

где ϵ_i — собственные энергии состояний частиц. Как и в случае с методом силовых постоянных, выражение для общей энергии системы затем используется для вычисления силы:

$$\underline{F_i} = -\frac{dE_{tot}}{dR_i} = -\frac{\delta E_{tot}}{\delta R_i} - \sum_{\mu} \frac{\delta E_{tot}}{\delta \chi_{\mu}} \frac{\delta \chi_{\mu}}{\delta R_i}$$
(10)

Из уравнения (10) видно, что сила, действующая на ядро, находящееся в облаке электронов, зависит от количества степеней свободы ядра, а также от выбора набора базисных функций.

Для решения задачи о гармоническом приближении одной теории функционала плотности недостаточно. Для оценки второй производной общей энергии системы по радиус-вектору ядра используется также теория возмущений.

Метод теории функционала плотности является численным, что одновременно является его достоинством и недостатком. С одной стороны, численное представление решения в виде линейной комбинации конечного набора базисных функций вводит очевидную погрешность. К тому же, для систем со сложными взаимодействиями это может привести к большому количеству необходимых вычислений. С другой стороны, правильный выбор базисных функций и использование больших численных мощностей может дать очень точные результаты для систем, теоретическое описание которых затруднено.

Краткое сравнение всех описанных выше методов приведено в таблице А.1 приложения А. Важно отметить, что рассмотренные выше методы не являются взаимоисключающими. Они дополняют друг друга и являются логичным продолжением.

В этой работе для решения задачи распространения тепла в кристалле была выбрана модель Борна-фон-Кармана. Это связано с тем, что основной целью работы является теоретический анализ влияния взаимодействий дальнего порядка на характер распространения тепла в кристалле. Модель Борна-фон-Кармана позволит нам просто ввести дополнительные параметры в систему и аналитически отследить желаемую зависимость. Помимо этого, данная модель широко используется в других работах научной школы, к которой относит себя автор.

Безусловно, это означает, что для применения данных результатов на практике, необходимо будет определить жёсткости пружин. Это может быть сделано целым рядом способов: например, при помощи проведения серии экспериментов и эмпирического подбора значений. Наиболее распространённым является метод линеаризации таких парных потенциалов, как потенциал Леннарда-Джонса, Ми или Морзе [15].

Однако целью работы не является анализ конкретного реального кристаллического тела, поэтому данный вопрос мы обсуждать не будем.

Перейдём непосредственно к вопросу описания колебаний в системе гармонических осцилляторов.

1.3. Гармонический кристалл, модель Борна-фон-Кармана

Гармонический кристалл, модель которого рассматривается в данной работе, представляет собой совокупность материальных точек, упорядоченных в идеальную кристаллическую решётку (то есть решётку без дефектов) и взаимодействующих посредством линеаризованных сил [13]. В модели Борнафон-Кармана данные силы носят квазиупругий характер. Стоит отметить, что использование линейных пружин в качестве модели взаимосвязи атомов гармонического кристалла верно лишь для одномерного случая.

Простейшим примером является одномерная цепочка, состоящая из атомов одинаковой массы (и одинаковой химической природы), расположенных друг от друга на равных расстояниях [9, 18]. Для ещё большего упрощения задачи предполагается, что существует взаимодействие только ближайших соседей. Модель данной системы представлена на рисунке 1.3.1.

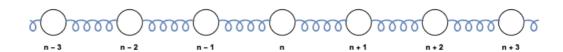


Рисунок 1.3.1. Модель одномерного одноатомного кристалла с учётом ближайших взаимодействий

Упругая сила, действующая на n-ую частицу со стороны её ближайших соседей, может быть записана при помощи закона Гука:

$$F_n = c_1(u_{n+1} - u_n) - c_1(u_n - u_{n-1}) = c_1(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1})$$
 (11)

где c_1 — жёсткость связи, u_n — отклонение n-ой частицы от её положения равновесия. Тогда уравнение динамики частицы может быть записано следующим образом:

$$m\ddot{u}_n = c_1(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) \tag{12}$$

Решение уравнения (12) может быть представлено в виде функции Блоха [7] — волновой функции, состоящей из произведения плоской волны на периодическую часть:

$$u_n = Ae^{i(akn + \Omega t)} \tag{13}$$

где A — амплитуда волны, a — равновесное расстояние между частицами, k — волновое число (пространственная частота колебаний), Ω — частоты колебаний во времени. Важно отметить, что правая часть выражения (13), вообще говоря, комплексная, в то время как перемещения u_n должны быть вещественными числами [17]. В действительности перемещения описываются действительной частью $Ae^{i(akn+\Omega t)}$, однако для удобства анализа системы данный факт опускается.

Используя выражение (13) в уравнении (12), мы можем перейти от дифференциального уравнения к алгебраическому, именуемому дисперсионным соотношением:

$$\Omega = \pm \sqrt{\frac{4c_1}{m}} \sin\left(\frac{ak}{2}\right) \tag{14}$$

Оно характеризует связь между частотой и волновым числом и определяет характеристики волн, которые могут распространяться в свободном кристалле. Волны, частоты которых больше максимально возможной Ω_{max} , будут затухать.

Если известны дисперсионные соотношения, можно определить групповую скорость, характеризующую скорость, с которой в среде распространяются волны:

$$c_{gr} = \pm a \sqrt{\frac{c_1}{m}} \cos\left(\frac{ak}{2}\right) \tag{15}$$

Групповая скорость – есть скорость распространения импульса возмущения, называемого волновым пакетом [9]. Функция, описывающая

импульс возмущения, может быть представлена в виде суперпозиции гармонических колебаний. Каждое из них определяет собственную бегущую волну, удовлетворяющую дисперсионному соотношению, и распространяется со скоростью, равной отношению частоты к волновому числу. Общий характер распространения волнового пакета и описывается групповой скоростью.

Таким образом, используя модель Борна-фон-Кармана, исследователь может определить параметры волн, способных распространяться в кристалле с заданной конфигурацией, а также характер поведения волнового пакета некоторого начального возмущения в среде с течением времени.

Отметим, что представленное выше решение, предполагает бесконечно большой кристалл. Данная модель позволяет отбросить влияние граничных условий на распространение волн (например, их отражение от конечной частицы). Переход к задаче о рассмотрении конечного кристалла, состоящего из N частиц, приводит к тому, что волновой вектор может принимать только N различных значений, то есть решение задачи становится дискретным. Однако в данной работе этот случай рассматриваться не будет.

Мы рассмотрели простейший случай использования модели Борна-фон-Кармана для анализа распространения волн в кристаллической структуре. Очевидно, что линейная одноатомная цепочка с взаимодействиями с ближайшими соседями далеко не всегда отвечает действительности. В связи с этим, возникла потребность в построении более продвинутых моделей.

Как говорилось выше, модель одномерного гармонического кристалла характеризуется несколькими параметрами:

- Масса частиц;
- Равновесное расстояние между частицами;
- Количество взаимодействующих соседей;
- Сила взаимодействий (описываемая через жёсткость связи).

Простейший случай представлял собой цепочку равных масс, находящихся на равном расстоянии друг от друга и взаимодействующих некоторым равным образом с ближайшими соседями.

Одним из возможных усложнений данной системы является двухатомная цепочка [9, 16, 18, 35], т. е. цепочка, в которой встречаются два чередующихся типа частиц с разной массой (рисунок 1.3.2). При этом каждая частица взаимодействует только со своими ближайшими соседями, которые являются частицами другого типа.



Рисунок 1.3.2. Модель одномерного двухатомного кристалла с учётом ближайших взаимодействий

Можно записать уравнения динамики частиц массы m_1 и массы m_2 :

$$m_1 \ddot{u}_{n,1} = c(u_{n-1,2} - 2u_{n,1} + u_{n,2}) \tag{16}$$

$$m_2 \ddot{u}_{n,2} = c(u_{n,1} - 2u_{n,2} + u_{n+1,1}) \tag{17}$$

где c — жёсткость пружин, соединяющих частицы (в простейшем случаи они равны между собой), m_i — масса частицы i-ого типа, $u_{n,i}$ — смещение n-ой частицы i-ого типа.

В зависимости от научной школы переход от уравнений (16) – (17) к дисперсионным соотношениям и групповым скоростям может быть реализован несколькими способами. Самый простой вариант [9] предполагает следующую запись:

$$\Omega_{1,2} = \frac{c}{m_1 m_2} \left((m_1 + m_2) \pm \sqrt{m_1^2 + m_2^2 + 2m_1 m_2 \cos(ak)} \right)$$
 (18)

Дисперсионное условие имеет два корня, что означает, что каждому волновому числу k соответствует две волны. При этом та ветвь, которая соответствует выражению (18) со знаком плюс, называется оптической, а

соответствующая знаку минус — акустической. Это связано с тем, что в оптической ветви частицы колеблются в противофазе, с амплитудами, обратно пропорциональными массам. В случае, если на частицах есть свободные заряды, колебания оптической ветви приводят к изменению дипольного момента элементарной ячейки (двух частиц разных масс), отчего возможно взаимодействие со светом.

Выражение (18) позволяет быстро определить дисперсионные соотношения для конкретной двухатомной одномерной кристаллической решётки, что полезно при анализе реальной системы. Однако для теоретического описания влияния масс частиц на характер распространения волн в системе разумней использовать один из двух других подходов:

– Выразить массы через параметр α так, что [35]:

$$m_1 = \alpha m \tag{19}$$

$$m_2 = \frac{m}{\alpha} \tag{20}$$

– Выразить массы через угол β [15]:

$$m_1 = m \tan \left(\frac{\pi}{4} + \beta\right) \tag{21}$$

$$m_2 = \frac{m}{\tan\left(\frac{\pi}{4} + \beta\right)} \tag{22}$$

Как легко понять, два метода легко сводятся друг к другу посредством обозначения $\alpha = \tan\left(\frac{\pi}{4} + \beta\right)$. Если подставить выражения (21) – (22) в формулу (18), получим дисперсионное соотношение:

$$\Omega_{1,2} = \frac{\Omega^0}{\sqrt{2\cos 2\beta}} \left(1 \pm \sqrt{1 - \frac{1}{2}\cos^2 2\beta \left(1 - \cos(2ak) \right)} \right)$$
 (23)

где $\Omega^0 = 2\omega$ — максимальное значение частоты для одноатомной цепочки. Групповая скорость может быть найдена как производная выражения (23):

$$c_{gr\,1,2} = \mp sign(2ak) \frac{c_g^0 \Omega^0 \cos 2\beta \sin(2ak)}{4\Omega_{1,2} \sqrt{1 - \frac{1}{2} \cos^2 2\beta (1 - \cos(a2k))}}$$
(23)

где $c_g^0 = a\omega$ — максимальное значение групповой скорости для одноатомной цепочки. Был проведён анализ дисперсионных кривых и групповых скоростей для двухатомной цепочки при различных значения параметра β и показано, что в двухатомной цепочке распространяется две волны, и определена зависимость экстремумов групповых скоростей от параметра. Для оптической ветви экстремум будет наблюдаться в диапазоне $ak \in \left(\frac{\pi}{2};\pi\right)$, для акустической — всегда при ak=0. Был сделан вывод, что скорость волны, соответствующей оптической ветке будет конечной вплоть до достижения точного равенства, то есть две волны будут распространяться в системе даже при небольшом отличии масс.

Данный вывод важен как с теоретической, так и прикладной точки зрения. Он показывает, насколько модель идеального кристалла с отсутствием дефектов может сильно отличаться от реальной системы.

Другой вариант более сложной модели кристаллической структуры – кристалл с учётом второй координационной сферой. Она соответствует ситуации, в которой взаимодействия есть между первыми и вторыми ближайшими соседями (рисунок 1.3.3).

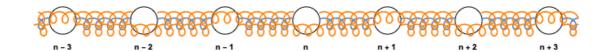


Рисунок 1.3.3. Модель одномерного одноатомного кристалла с учётом второй координационной сферы

Уравнение динамики n-ой частицы в этом случае записывается следующим образом:

$$m\ddot{u}_n = c_1(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) + c_2(u_{n+2} - 2u_n + u_{n-2})$$
 (24)

Дисперсионное соотношение в таком случае может быть представлено следующей формулой:

$$\Omega = \pm \sqrt{\frac{4c_1}{m}} \sin^2\left(\frac{ak}{2}\right) + \frac{4c_2}{m} \sin^2(ak)$$
 (25)

Для теоретического анализа кристалла с учётом второй координационной сферы дисперсионное соотношение было переписано [16, 32] следующим образом:

$$\Omega = \pm 2 \sin\left(\frac{ak}{2}\right) \sqrt{\omega_0^2 \cos^2\left(\frac{ak}{2}\right) + \omega_1^2 \sin^2\left(\frac{ak}{2}\right)}$$
 (26)

где $\omega_0^2 = \frac{c_1 + 4c_2}{m}$ и $\omega_1^2 = \frac{c_1}{m}$. Аналогично работе по диатомной решётке, была введена параметризация:

$$\omega_0 = \omega \sqrt{2} \sin\left(\frac{\pi}{4} + \beta\right) \tag{27}$$

$$\omega_1 = \omega\sqrt{2}\cos\left(\frac{\pi}{4} + \beta\right) \tag{28}$$

Параметр β изменяется в пределах $\beta \in \left(-\frac{\pi}{4}; \frac{\pi}{4}\right)$, знак β совпадает со знаком жёсткости c_2 , которая в данной системе может быть отрицательной. Можно выделить три предельных случая:

- $-\beta = 0$ задача сводится к задаче о простейшей одноатомной одномерной кристаллической решётке с равновесным расстоянием a, где a расстояние между двумя ближайшими частицами;
- $-\beta = \frac{\pi}{4}$ задача сводится к задаче о простейшей одноатомной одномерной кристаллической решётке с равновесным расстоянием 2a, где a расстояние между двумя ближайшими частицами;
- $-\beta = -\frac{\pi}{4}$ предельное значение отрицательной жёсткости c_2 , при котором цепочка всё ещё остаётся устойчивой.

Подставив выражения (27) и (28) в (26), получим следующий окончательный вид дисперсионной зависимости:

$$\Omega = \frac{\Omega^0}{\sqrt{2}} \sqrt{(1 + \sin 2\beta \cos(ak))(1 - \cos(ak))}$$
 (29)

где Ω^0 имеет ту же природу, что и в случае с диатомной одномерной решёткой с учётом первой координационной сферы. Групповая скорость, полученная как производная дисперсии по волновому числу, равна:

$$c_{gr} = \frac{c_g^0 \Omega^0}{2\Omega} \sin(ak) (1 + (2\cos(ak) - 1)\sin 2\beta)$$
 (30)

Анализ графиков групповых скоростей показал [16], что в кристалле данной конфигурации при определённых значениях параметра β (больших по модулю $\frac{\pi}{16}$) будет распространяться два волновых фронта, двигающихся друг за другом. Значение параметра влияет на скорость волн нелинейным образом (рисунок 1.3.4).

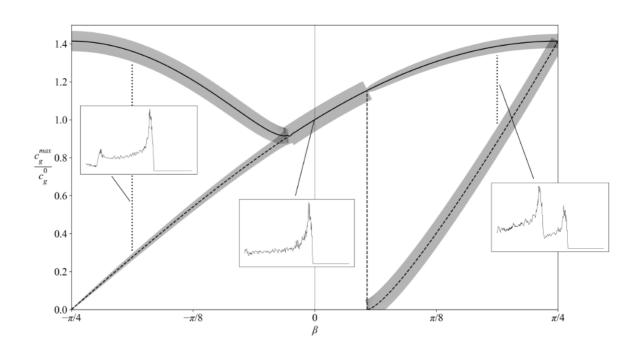


Рисунок 1.3.4. Зависимость максимальной групповой скорости от β в одномерной одноатомной кристаллической решётке с учётом второй координационной сферы [16, стр. 11]

Безусловно, стоит отметить, что на практике, особенно с учётом наличия больших вычислительных мощностей, задачи о распространении волн в реальном кристалле, в котором взаимодействия задаются одним из парных потенциалов (или более сложной функцией) и определены для нескольких координационных сфер, могут быть решены численным способом. Однако

теоретическое описание процессов в материалах с подобной структурой сильно отстало и не обеспечивает тех возможностей, которые предоставляет численное моделирование.

Таким образом, для решения задачи качественного и количественного описания волн, способных распространяться в одномерном бесконечном кристалле заданной конфигурации (т. е. с заданным количеством частиц различного типа и определённым характером взаимодействий), с использованием модели Борна-фон-Кармана необходимо проделать следующий алгоритм:

- Определить квазиупругие силы, действующие на *n*-ую частицу;
- Записать уравнение динамики n-ой частицы (второй закон Ньютона);
- Подставить функцию Блоха в уравнение динамики и перейти к алгебраическому уравнению, определяющему связь двух частоты колебаний. – к дисперсионному соотношению;
- Продифференцировать дисперсионное соотношение по волновому числу и определить групповую скорость;
- Определить количество экстремумов функции групповой скорости,
 тем самым охарактеризовав количество волн, распространяющихся
 в кристалле.

Если требуется провести анализ влияния изменяющегося параметра системы на характер распространения волн, может потребоваться параметризация, по аналогии с продемонстрированной выше. Зная количество волн, распространяющихся в исследуемой кристаллической решётке, и их скорость, можем оценить характер протекания тепловых процессов в кристалле. Об этом пойдёт речь в следующем параграфе.

1.4. Тепловые процессы в кристалле

Тепловые процессы в твёрдом теле могут быть описаны несколькими способами в зависимости от рассматриваемой модели. В общем случае, на макроскопическом уровне, когда среда может рассматриваться как сплошная и преобладает диффузионная теплопередача, используется закон Фурье – линейная зависимость между потоком тепла и градиентом температуры. Однако в случае перехода на микроуровень, где среда уже является дискретной, ключевым становится процесс баллистической теплопередачи, что приводит к отклонениям поведения системы от закона Фурье [33]. Более того, использование данного закона приводит к парадоксу: распространению малых тепловых возмущений с бесконечной скоростью.

Распределение температуры в различных кристаллических структурах можно исследовать различными способами, большинство из которых являются численными. Например, при рассмотрении многослойной структуры нанокомпозитов с предположением, что температура остаётся постоянной в каждом слое и изменения происходят только на границах, уравнение теплопроводности решается при помощи нейронных сетей [1]. Другие методы численного моделирования процессов теплопереноса включают в себя методы Рунге-Кутты, методы конечных элементов и другие. Выбор аппарата, используемого для решения задачи, зависит от её особенностей, в том числе и от используемой математической модели.

В данной работ рассмотрен подход, подробное описание которого приведено в пособии [13]. Он основан на введении в рассмотрение не одной, а бесконечного множества систем одинаковой конфигурации. Задача описания динамики частиц, составляющих систему, представляет собой дифференциальные уравнения и начальные условия. При использовании данного метода начальные условия предполагаются случайными. Совокупность всех рассматриваемых систем носит название ансамбля. Вводится кинетическая

температура — величина, пропорциональная сумме кинетических энергий частиц в элементарной ячейке:

$$k_B T(x) = m \langle v(x)^2 \rangle \tag{31}$$

где k_B — постоянная Больцмана; v(x) — скорость частиц с координатой x; $\langle ... \rangle$ — математическое ожидание. Можно записать уравнение динамики относительно ковариаций скоростей и координат. Аналитическое решение данного уравнения описывает характер распространения тепла в кристаллической системе.

В [31] показано, что при начальном тепловом воздействии, описываемом функцией $T_0(x)$, кинетическая температура в кристаллической структуре может быть найдена по следующей формуле:

$$T(x,t) = T_F(x,t) + T_S(x,t)$$
 (32)

где $T_F(x,t)$ — температура быстрых, $T_S(x,t)$ — температура медленных процессов. Быстрые процессы представляют собой затухающие во времени колебания, связанные с перераспределением энергии между кинетической и потенциальной составляющей. Время, во время которого данные процессы являются существенными, составляет порядка десяти периодов атомных колебаний.

При достаточно больших временах кинетическая температура в системе полностью определяется вторым слагаемым — температурой медленных процессов $T_S(x,t)$. Они определяются баллистическим теплопереносом и могут быть представлены как суперпозиция волн, имеющих форму начального возмущения и распространяющихся со скоростью, равной групповой.

В данной работе будем рассматривать достаточно большие времена, т. е. ограничимся медленными процессами, описывающими непосредственно процесс теплопереноса. Согласно исследованиям [30-31] температура может быть охарактеризована следующей формулой:

$$T_S(x,t) = \frac{1}{8\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \left(T_0(x + c_{gr}(ak)t) + T_0(x - c_{gr}(ak)t) \right) d(ak)$$
 (33)

Как видно из выражения (33), групповая скорость играет важную роль при анализе тепловых процессов в кристалле. Существует два подхода к определению температурного профиля:

- Численное решение уравнения (33) с заданным начальным возмущением $T_0(x)$;
- Построение приближения аналитического решения фундаментальной задачи.

Численное решение уравнения (33) может осуществляться различными способами. На данный момент существует огромное семейство методов, способных решать численные интегралы. В случае простейших начальных возмущений (например, постоянной температуры по всему кристаллу или линейной зависимости) выражение для температуры может быть получено аналитически.

Фундаментальное решение задачи теплопереноса для различных кристаллических систем было построено в [16, 31–33]. Было взято начальное возмущение в виде дельта-функции, т. е. бесконечно узкого прямоугольного импульса бесконечной высоты. Тогда формула (33) может быть переписана с учётом конкретного вида начального возмущения и возможности рассматривать несколько типов атомов (что обеспечивает применимость данной модели для полиатомных структур):

$$T(x,t) = \frac{T_0}{8\pi N} \int_{-\pi}^{\pi} \sum_{j=1}^{N_a} \left(\delta(x + c_{gr}(ak)t) + \delta(x - c_{gr}(ak)t) \right) d(ak)$$
(34)

где T_0 — амплитуда начального теплового возмущения, N_a — количество типов атомов. Учтём два свойства дельта-функции: $\delta(\lambda x) = \frac{\delta(x)}{|\lambda|}$ и $\int \delta(f(z))dz = \sum_i \frac{\delta(z-z_i)}{|f'(z_i)|}$ где суммирование идёт по вещественным корням уравнения f(z) = 0. Тогда фундаментально решение задачи теплопереноса для произвольной полиатомной цепочки, состоящей из N_a частиц и характеризующейся групповой

скоростью $c_{gr}(ak)$ (где может учитываться взаимодействие с разным количеством соседей) может быть найдено по формуле:

$$T(x,t) = \frac{T_0}{4\pi Nt} \sum_{j=1}^{N_a} \sum_{i} \frac{1}{|c'_{gr}(ak_i)|}$$
(35)

где k_i — решения уравнений $\left|c_{gr}(ak_i)\right| = \frac{|x|}{t}$. Из данной постановки решения можно сделать несколько выводов:

- Количество тепловых фронтов, распространение которых может наблюдаться в кристалле, соответствует количеству корней уравнения $|c'_{qr}(ak_i)| = 0$;
- Максимальная координата x, которой в момент времени t будет соответствовать ненулевое значение температуры, будет соответствовать значению $x = \max c_{gr} t$;
- В точке фронта функция (35) будет иметь особую точку с нулём в знаменателе.

Чтобы оценить интенсивность теплового фронта в этой точке (то есть на границе волны), необходимо построить её аппроксимацию. Для одноатомной цепочки это можно сделать при помощи разложения групповой скорости и её производной в ряд Тейлора:

$$\left|c'_{ar}(ak_* + \epsilon)\right| = \left|c'_{ar}(ak_*) + c''_{ar}(ak_*)\epsilon\right| \tag{36}$$

$$\left| c_{gr}(ak_* + \epsilon) \right| = \left| c_{gr}(ak_*) + c'_{gr}(ak_*)\epsilon + \frac{1}{2}c''_{gr}(ak_*)\epsilon^2 \right| \tag{37}$$

Учтя тот факт, что $c_{gr}'(ak_*)=0$, перепишем уравнение (36) и подставим его в (37). Тогда получим, что:

$$\frac{1}{|c'_{gr}(ak_i)|} = \frac{1}{\sqrt{2|c''_{gr}(ak_*)|}} \frac{1}{\sqrt{c_{gr}(ak_*) - c_{gr}(ak_* + \epsilon)}}$$
(38)

Можно ввести коэффициент интенсивности $A=\frac{1}{\sqrt{2|c_{gr}^{\prime\prime}(ak_*)|}}$.

В параграфе 1.3 были рассмотрены случаи двухатомной цепочки с учётом первой координационной сферы и одноатомной цепочки с учётом второй координационной сферы. Решения фундаментальной задачи теплопереноса для этих задачи были построены в [16, 32].

Для двухатомной цепочки оптическая ветвь имеет два корня ζ_* , равных по модулю. В связи с этим коэффициенты интенсивности для оптической ветки будут равны. Тогда для акустической и оптической ветвей выражение (35) с учётом формулы (38) может быть записано в следующем виде:

$$\frac{T}{T_0} \approx \begin{cases}
\frac{A_1}{\sqrt{\zeta_{1*} - \zeta}} + \frac{A_2}{\sqrt{\zeta_{2*} - \zeta}}, & 0 < \zeta < \zeta_{1*} \\
\frac{A_2}{\sqrt{\zeta_{2*} - \zeta}}, & \zeta_{1*} < \zeta < \zeta_{2*} \\
0, & \zeta_{2*} < \zeta
\end{cases}$$
(39)

где

$$\begin{cases}
A_1 = \frac{1}{2\pi t} \frac{1}{\sqrt{2|c_{gr,1}''(2ak_{1*})|}} \\
A_2 = \frac{1}{2\pi t} \frac{1}{\sqrt{2|c_{gr,2}''(2ak_{1*})|}}
\end{cases} (40)$$

При изменении параметра β от его минимального значения, когда одна масса много больше другой, к его максимальному значению, соответствующему случаю одноатомной цепочки, наблюдается увеличение интенсивности акустического фронта и уменьшение оптического. При некотором промежуточном значении β коэффициенты интенсивности равны между собой.

Для одноатомной цепочки с учётом второй координационной сферы фундаментальное решение состоит из двух волн, следующих друг за другом. Интересен тот факт, что при положительных значениях параметра β интенсивность волны, распространяющейся с большей скоростью, меньше. При предельных значениях параметра β наблюдается одна волна. При этом в случае $\beta = \frac{\pi}{4}$ две волны объединяются в одну (то есть их скорости совпадают), в то

время как при $\beta = -\frac{\pi}{4}$ скорость и коэффициент интенсивности одной волны уходят в ноль (рисунок 1.3.4).

Таким образом, решение задачи теплопереноса может осуществлять в нескольких направлениях. Во-первых, может быть построено фундаментальное решение. Оно позволяет оценить интенсивность волн, распространяющихся в кристалле со скоростями, равными экстремумам групповой скорости. Его использование полезно при теоретическом анализе системы, например, в случае введения дополнительной координационной сферы, так как определяет характер зависимости коэффициента интенсивности распространяющейся волны в зависимости от меняющегося параметра кристалла.

Во-вторых, выражение (33) может быть посчитано при помощи численных методов. Это позволяет оценить характер распространения тепла в кристаллической под воздействием реального начального возмущения (например, прямоугольного импульса конечной ширины и высоты).

1.5. Постановка задачи

В предыдущих параграфах мы рассмотрели основы анализа одномерной бесконечной кристаллической структуры при помощи модели Борна-фон-Кармана. Можно составить алгоритм работы с системой, подобной изученным.

Во-первых, с использованием уравнения динамики частицы и квазиупругого приближения сил взаимодействия, находятся дисперсионные соотношения и групповые скорости. Могут быть определены экстремумы графика групповых скоростей, т. е. количество волн, распространяющихся в кристалле, и их скорости. Во-вторых, строится приближенное фундаментальное решение задачи теплопереноса. Определяются коэффициенты интенсивности распространяющихся волн. В-третьих, строится численное решение задачи теплопереноса для частного случая начального возмущения.

В следующих главах рассматривается одномерный бесконечный одноатомный кристалл, описываемый моделью Борна-фон-Кармана, с учётом взаимодействий дальнего порядка. Количество квазиупругих взаимодействий между частицами характеризуется номером координационной сферы. Первая координационная сфера соответствует взаимодействию с ближайшими соседями (рисунок 1.3.1), вторая – с ближайшими и вторыми ближайшими (рисунок 1.3.2) и т. д.

Рассматриваемая математическая модель описывается следующими параметрами:

- Масса частиц *m*;
- Равновесное расстояние a;
- Номер координационной сферы *N*;
- Жёсткость пружин c_i .

Задача работы заключается в том, чтобы при фиксированных трёх параметрах конфигурации кристаллической решётки изучить влияние значения вариативного параметра на характер распространения тепла в среде. Анализ необходимо провести по аналогии с частными случаями, рассмотренными в параграфах 1.3 и 1.4.

Рассматривается две различные системы.

Во второй главе изучен одномерный одноатомный кристалл с учётом третьей координационной сферы (рисунок 1.5.1).

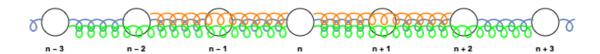


Рисунок 1.5.1. Модель одномерного одноатомного кристалла с учётом третьей координационной сферы

Жёсткость пружин c_1 , c_2 и c_3 , соединяющих частицы с различными соседями, может изменяться в таких пределах, при которых структура остаётся устойчивой.

В третьей главе данной работы исследован одномерный одноатомный кристалл с N-ой координационной сферой, где N — переменная, которая может принимать целочисленные значения от 1 до 1000. Жёсткость пружин, соединяющих частицу с её i-ым соседом, описывается формулой: $c_i = \frac{1}{i^4}$.

ГЛАВА 2. РАСПРОСТРАНЕНИЕ ТЕПЛА В КРИСТАЛЛЕ С ТРЕТЬЕЙ КООРДИНАЦИОННОЙ СФЕРОЙ С ВАРИАТИВНЫМИ ЖЁСТКОСТЯМИ

2.1. Дисперсионное соотношение и групповая скорость

Рассмотрим одномерный бесконечный кристалл с третьей координационной сферой, в котором жёсткость пружин, соединяющих частицу с её i-ым соседом, может принимать произвольные значения, при которых система остаётся устойчивой. Дисперсионное соотношение может быть записано следующим образом:

$$\Omega = \pm \sqrt{\frac{c_1}{m} \sin^2\left(\frac{ak}{2}\right) + \frac{c_2}{m} \sin^2\left(ak\right) + \frac{c_3}{m} \sin^2\left(\frac{3ak}{2}\right)}$$
(41)

Из выражения (41) видно, что область устойчивости соответствует таким значениями жёсткостей, при которых выражение под знаком корня больше нуля (иначе частота будет являться комплексным числом, что физически невозможно). Помимо этого видно, что значения жёсткостей существенно влияют поведение системы: количество экстремумов и их положение. Формула (41) представляет дисперсионное соотношение как сложную функцию трёх декартовых координат c_1 , c_2 и c_3 . Однако в таком виде с ней неудобно работать, к тому же, рассмотрение трёхмерного пространства параметров — задача далеко не тривиальная, поэтому перейдём от декартовых к сферическим координатам следующим образом (по аналогии с [16]):

$$\omega_1 = \sqrt{\frac{c_1}{m}} = \omega \sqrt{2} \cos \gamma \cos \left(\beta + \frac{\pi}{4}\right) \tag{42}$$

$$\omega_{12} = \sqrt{\frac{c_1 + 4c_2}{m}} = \omega\sqrt{2}\cos\gamma\sin\left(\beta + \frac{\pi}{4}\right) \tag{43}$$

$$\omega_3 = \sqrt{\frac{c_3}{m}} = \omega\sqrt{2}\sin\gamma\tag{44}$$

Параметр ω выполняет нормализующую функцию и может быть опущен. Сила взаимодействий между различными соседями определяется всего двумя

параметрами: $\gamma \in \left[0; \frac{\pi}{2}\right]$ и $\beta \in \left[-\frac{\pi}{4}; \frac{\pi}{4}\right]$. Можно выделить несколько предельных случаев, как и в случае задачи со второй координационной сферой:

- $-\gamma=0$ соответствует ситуации, когда между частицей n и частицами n+3 и n-3 нет взаимодействий, то есть не рассматривается третья координационная сфера. В этом случае задача сводится к рассмотрению тепловых нестационарных процессов в кристалле с первой ($\beta=0$) или второй ($\beta=\frac{\pi}{4}$) координационной сферой, которые были рассмотрены ранее [16, 32];
- Значение $\beta = -\frac{\pi}{4}$ соответствует предельной отрицательной жёсткости связи между частицей и её второй координационной сферой, при которой система остаётся устойчивой. Отметим, что из всех трёх жесткостей при таком определении параметров отрицательной может быть только жёсткость вторых связей, в то время как первая и третья остаются положительными;
- $-\gamma = \frac{\pi}{2}$. При этом частица n взаимодействует с частицами n+3 и n-3, но не взаимодействует с более близкими соседями. Он соответствует одномерной гармонической цепочке с утроенными равновесными состояниями, и наблюдается распространение одной волны.

Используя параметризацию (42) – (44), перепишем выражение (41):

$$\Omega = \pm \frac{\Omega^0}{\sqrt{2}} \sqrt{\cos^2 \gamma (1 - \cos ak) [1 + \cos ak \sin 2\beta] + 2\sin^2 \gamma (1 - \cos(3ak))}$$
 (45)

где $\Omega^0 = 2\omega$ — максимальная частота для одномерной одноатомной цепочки с учётом первой координационной сферы. Первое слагаемое выражения (45) отвечает за взаимодействие n-ой частицы с её первой и второй координационными сферами; второе — с третьей.

На рисунках 2.1.1 и 2.1.2 представлены графики дисперсионных соотношений для различных значений параметров β и γ . Можно сделать вывод,

что при фиксированном значении параметра β , отвечающего за взаимодействие между частицей n и частицами n-1,n+1,n-2 и n+2, и изменении параметра γ взаимодействия между частицей n и частицами n-3 и n+3 становятся сильней, что соответствует появлению третьего экстремума на графике дисперсионного соотношения. Данный экстремум соответствует локальному минимуму и тем более выраженный, чем больше величина относительной силы взаимодействия с третьей координационной сферой. То же самое можно сказать и про остальные экстремумы функции: при увеличении влияния третьей координационной сферы (что соответствует также уменьшению влияния первой и второй координационных сфер) значения экстремумов возрастают, пока не достигают своего максимума при $\gamma = \frac{\pi}{2}$.

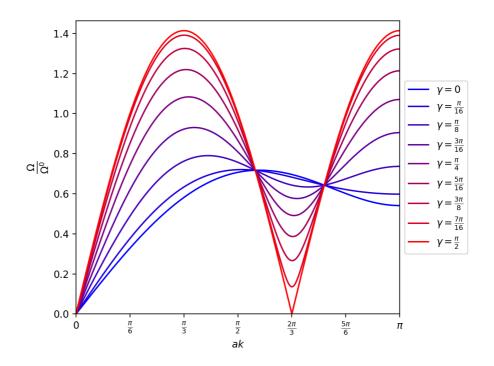


Рисунок 2.1.1. Дисперсионные кривые как функции параметра γ при фиксированном $\beta = \frac{\pi}{16}$

Стоит отметить, что в случае, когда $\gamma \neq \frac{\pi}{2}$, график дисперсионных соотношений имеет одно пересечение с осью абсцисс. Если $\gamma = \frac{\pi}{2}$, дисперсионное соотношение принимает значение, равное нулю, при двух значениях волнового числа: k=0; $k=\frac{2\pi}{3}$.

В случае, когда фиксировано значение параметра γ , изменение количества экстремумов не наблюдается (рисунок 2.1.2). Однако происходит изменение в величине и форме кривой для двух локальных максимумов функции, что соответствует перераспределению силы взаимодействий между первой и второй координационной сферами.

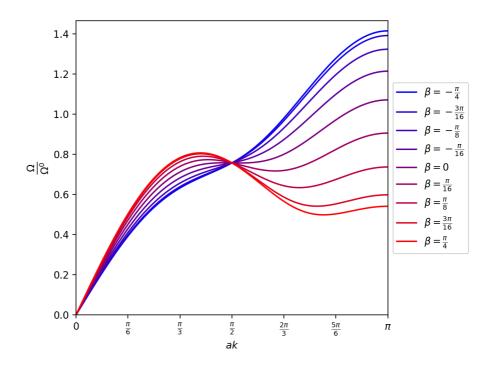


Рисунок 2.1.2. Дисперсионные кривые как функции параметра β при фиксированном $\gamma = \frac{\pi}{16}$

Отметим, что при увеличении значения β значение крайнего экстремума функции уменьшается. Также стоит указать на то, что при малых значениях параметра γ график дисперсионных соотношений не всегда будет иметь три ярко выраженных экстремума.

Групповая скорость, характеризующая распространение волн в кристалле, определяется в случае третьей координационной сферы следующим образом:

$$c_{\rm gr} = \frac{\Omega^0 c_g^0}{2\Omega} [\cos^2 \gamma \sin(ak) \left[1 + (2\cos(ak) - 1)\sin(2\beta) \right] + 3\sin^2 \gamma \sin(3ak) \right] (46)$$

где c_g^0 — максимальная групповая скорость для одномерной одноатомной цепочки с учётом первой координационной сферы.

Были построены графики, аналогичные представленным выше (рисунок 2.1.3 и рисунок 2.1.4). При изучении групповых скоростей видно, что при определённом значении γ большем нуля в среде возникает третья волна, которая распространяется со скоростью, по модулю близкой к скорости второй волны. Абсолютное значение минимума функции соответствует скорости, с которой данная волна распространяется.

Стоит обратить внимание на случай $\gamma = \frac{\pi}{2}$. Выше говорилось, что в этом случае наблюдается одна волна. Здесь необходимо, однако, уточнить один момент: как видно из графика групповых скоростей, волны три. Однако их скорости совпадают, что приводит к их слиянию в одну.

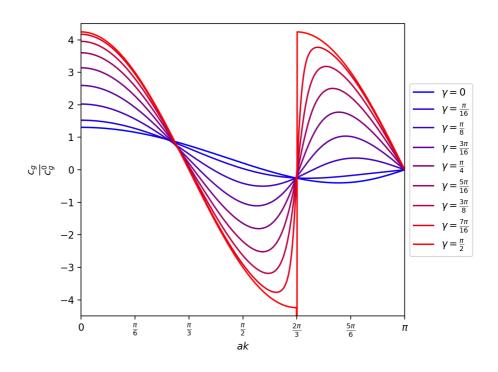


Рисунок 2.1.3 Групповая скорость как функция параметра γ при фиксированном $\beta = \frac{\pi}{16}$

В случае, когда фиксировано значение параметра γ , как и в случае с дисперсионными соотношениями, изменения количество экстремумов функции групповой скорости не наблюдается (рисунок 2.1.4). При этом значение первого экстремума увеличивается, а значения минимума и второго максимума уменьшаются. Отметим, что для положительных значений параметра β значение

групповой скорости в точке экстремума, соответствующего локальному минимуму функции, положительное, в то время как для отрицательных β — меньше нуля.

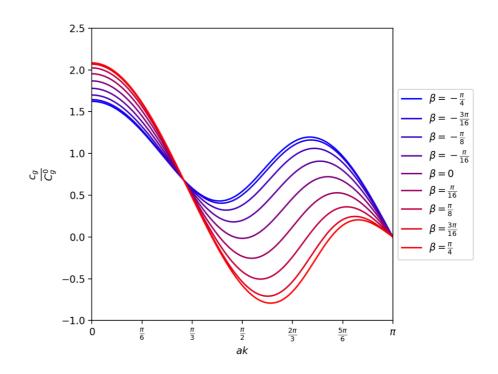


Рисунок 2.1.4 Групповая скорость как функция параметра β при фиксированном $\gamma = \frac{\pi}{16}$

Важно отметить следующий момент: изменение значений параметров β и γ приводит к изменению координаты (по оси абсцисс) экстремумов функции. Из рисунков 2.1.3 и 2.1.4 видно, что при любых значениях параметров наблюдается максимум при волновом числе k=0. Также на рисунке 2.1.3 видно, что при $\gamma=\frac{\pi}{2}$ экстремумы наблюдаются в точке $k=\frac{2\pi}{3}$ (напомним, что именно в этой точке график дисперсионного соотношения для этого случая равен нулю, и происходит резкое изменение характера поведения кривой групповых скоростей). Второй и третий экстремумы при $\gamma<\frac{\pi}{2}$ будут располагаться с обеих сторон от $k=\frac{2\pi}{3}$ и сходиться к нему при увеличении значения γ . При увеличении параметра β абсциссы обоих экстремумов будут смещаться вправо (то есть увеличиваться).

Как уже упоминалось ранее, скорость распространения каждой тепловой волны в кристалле характеризуется экстремумом функции групповой скорости.

В случае третьей координационной сферы в кристалле может распространяться от одной до трёх волн. Характер распространения самой быстрой волны определяется глобальным максимумом групповой скорости — сложной функцией параметров β и γ . На рисунке 2.1.5 представлен трёхмерный график, отображающий эту скорость на сфере возможных жёсткостей ω_1 , ω_{12} , ω_3 при фиксированном значении ω .

Видно, что при увеличении обоих параметров в целом наблюдается тренд увеличения максимальной групповой скорости: значение скорости в верхней половине четверти сферы больше, чем в нижней, максимальное возможное значение достигается при этом в точке, соответствующей $\gamma = \frac{\pi}{2}$. В верхней половине зависимость скорости от параметров монотонна, в то время как в нижней наблюдается полоса минимума и локальный максимум при малых значениях параметра β .

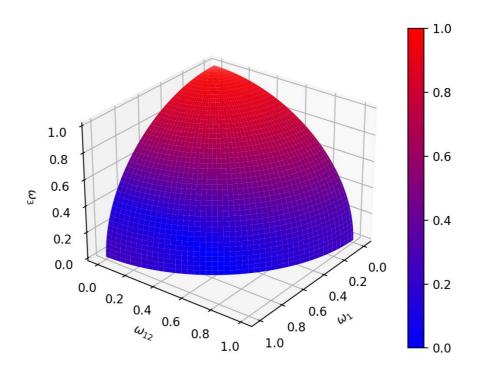


Рисунок 2.1.5 Нормализованная максимальная групповая скорость на сфере возможных значений жёсткостей системы

Стоит отметить, что максимальная групповая скорость, построенная на графике 2.1.5, не обязательно соответствует первому экстремуму функции. Как

будет видно в параграфе 2.2, при определённых значениях параметров скорость, наблюдаемая при k=0 будет являться локальным максимумом функции. В этом случае условно называемая нами первая волна будет распространяться с меньшей скоростью, чем условная третья.

Изучим более подробно характер распространения волн в среде, описываемой построенной нами математической моделью, при помощи фундаментального решения задачи теплопереноса.

2.2. Фундаментальное решение задачи о распространении тепла в кристалле

Построим приближенное фундаментальное решение задачи теплопереноса при возмущении в начальный момент времени равном дельта-функции $T_0(x) = T_0\delta(x)$. Данное решение позволяет охарактеризовать волну (или волны), которые распространяются в среде, при помощи двух характеристик: скорости распространения фронта и коэффициента интенсивности волны в его окрестности. Согласно параграфу 1.4, фундаментальное решение может быть записано следующим образом:

$$T(x,t) = \frac{T_0}{4\pi t} \sum_{j} \frac{1}{|c'_{gr}(ak_j)|}$$
 (47)

где k_j – решения уравнений

$$\left|c_{gr}(ak_j)\right| = \frac{|x|}{t} \tag{48}$$

В случае третьей координационной сферы, как видно из графиков групповых скоростей (рисунки 2.1.3 и 2.1.4) корней может быть от одного до трёх. Первая производная групповой скорости по волновому числу имеет следующий вид:

$$c'_{gr}(ak) = \frac{1}{\Omega} \left[\frac{ac_g^0 \Omega^0}{2} \left[\cos^2 \gamma \left(\cos ak \left(1 - \sin 2\beta \right) + 2 \cos 2ak \sin 2\beta \right) + 18 \sin^2 \gamma \cos 3ak \right] - c_{gr}^2 \right]$$
(49)

Координата фронта каждой тепловой волны, распространяющейся в кристалле, будет определяться локальными экстремумами групповой скорости. Как говорилось в параграфе 2.1, их может быть три. При этом первый экстремум наблюдается всегда при волновом числе k=0, в то время как два других, в зависимости от значений параметров β и γ , наблюдаются в промежутках $k \in \left[0; \frac{2\pi}{3}\right]$ и $k \in \left[\frac{2\pi}{3}; \pi\right]$ соответственно. Будем называть «первой» волну, распространяющуюся со скоростью, соответствующей первому экстремуму, «второй» — второму (локальный минимум функции групповой скорости), «третьей» — третьему.

Были построены графики, позволяющие оценить зависимость скорости распространения n-ой волны в зависимости от параметров β и γ . Важно отметить, что, в то время как для второй и третьей волн были использованы эмпирические результаты, для первой волны было возможно получить аналитический вид зависимости:

$$c_1(\beta, \gamma) = c_g^0 \sqrt{\cos^2 \gamma (1 + \sin 2\beta) + 18 \sin^2 \gamma}$$
 (50)

Рисунки 2.2.1–2.2.6 представляют собой срезы зависимостей скорости распространения одной из трёх волн от значения β или γ при фиксированном втором параметре.

Проанализируем полученные результаты. Как видно из рисунка 2.2.1, при значении параметра β , отличном от $-\frac{\pi}{4}$, график скорости имеет два экстремума - при $\gamma=0$ и $\gamma=\frac{\pi}{2}$.

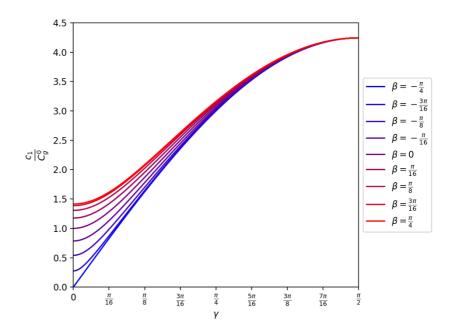


Рисунок 2.2.1. Скорость первой волны как функция параметра γ при фиксированном β

Зависимость имеет нелинейный вид и представляет собой монотонно возрастающую функцию. Тенденция, о которой мы говорили раньше (что скорость волны возрастает с увеличением влияния третьей координационной сферы) подтверждается.

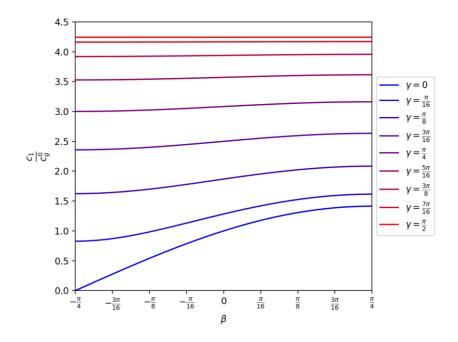


Рисунок 2.2.2. Скорость первой волны как функция параметра β при фиксированном γ

Интересны срезы скорости при фиксированном γ . Как видно из рисунка 2.2.2 с увеличением значения параметра β , скорость волны увеличивается. При этом при увеличении γ зависимость от β становится менее существенной и стремится к нулю: для случая $\gamma = \frac{\pi}{2}$ график принимает вид горизонтальной прямой. Это можно объяснить характером осуществлённой параметризации.

Рассмотрим теперь вторую и третью волны. Как видно из рисунков 2.2.3 и 2.2.5, не для всех значений параметров β и γ они существуют. Вторая волна наблюдается для всех γ только при определённых положительных значениях параметра β (рисунок 2.2.3), в то время как третья — при определённых положительных.

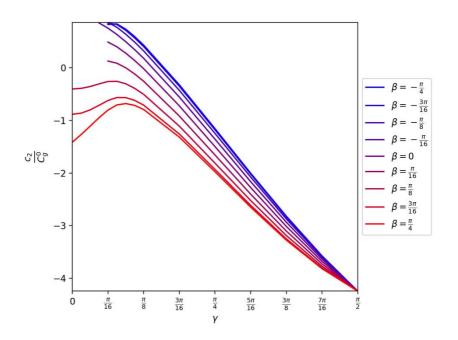


Рисунок 2.2.3. Скорость второй волны как функция параметра γ при фиксированном β

Срезы скорости при фиксированном γ для всех трёх волн очень похожи. Как видно из рисунков 2.2.4 и 2.2.6, при увеличении γ зависимость от β становится всё менее и менее существенной, пока вовсе не пропадает: для случая $\gamma = \frac{\pi}{2}$ графики принимают вид горизонтальной прямой, как и в случае с первой волной.

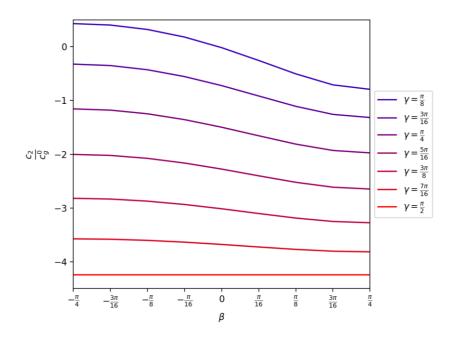


Рисунок 2.2.4. Скорость второй волны как функция параметра β при фиксированном γ

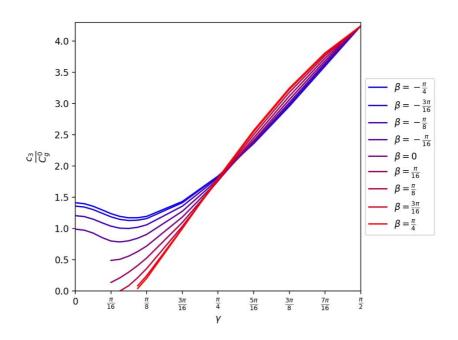


Рисунок 2.2.5. Скорость третьей волны как функция параметра γ при фиксированном β

Обратим внимание на отличительную особенность третьей волны: в отличие от функциональной зависимости скоростей первой и второй волн от γ , которые имели одинаковое поведение при разных значениях β в области $\gamma > \frac{\pi}{4}$,

скорость третьей волны в этой области ведёт себя различным образом (рисунок 2.2.6).

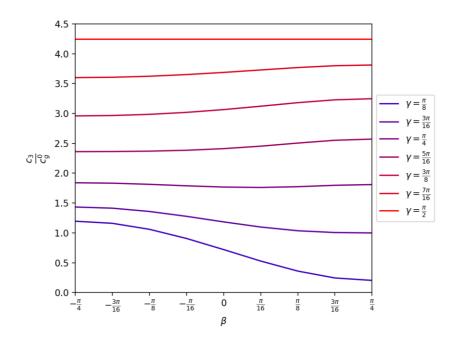


Рисунок 2.2.6. Скорость третьей волны как функция параметра β при фиксированном γ

Стоит также отметить, что зависимость скорости второй и третьей волны от β при фиксированном γ имеют похожий вид. Однако для второй волны скорость уменьшается, в то время как для третьей при одних значениях параметра γ возрастает, других - уменьшается.

Таким образом, можно сделать следующие выводы. При достаточно больших значениях параметра γ в кристалле наблюдается распространение трёх тепловых волн. Увеличение γ при фиксированном значении параметра β приводит к увеличению абсолютных величин скоростей волн. Значение β влияет на скорость распространения волны тем меньше, чем больше γ . При этом для первой и второй волны в большинстве своём увеличение β приводит к увеличению скорости по модулю.

Оценим коэффициенты интенсивности волн, распространяющихся в кристалле. Непосредственно в точке фронта выражение (47) имеет особую точку $(c'_{gr}(ak_i) = 0)$, поэтому значение температуры в её окрестности может быть

оценено посредством разложения групповой скорости и её первой производной в ряд Тейлора:

$$T(x,t) = \frac{T_0}{4\pi t} \frac{1}{\sqrt{\zeta^* - \zeta}} \frac{1}{\sqrt{2|c_{gr}''(ak^*)|}}$$
 (51)

где ζ^* - значение групповой скорости в особой точке, ζ — значение групповой скорости в окрестности особой точки. Вторая производная может быть определена по следующей формуле:

$$c_{gr}^{"}(ak) = -\frac{1}{\Omega} \left[\frac{a^2 c_g^0 \Omega^0}{2} \left[\cos^2 \gamma \left(\sin ak \left(1 - \sin 2\beta \right) + 4 \sin 2ak \sin 2\beta \right) + 54 \sin^2 \gamma \sin 3ak \right] + 3c_{gr}(ak) \frac{dc_{gr}}{dk}(ak) \right]$$
(52)

Анализируя выражение (52), можем сказать, что поведение фундаментального решения в окрестности теплового фронта имеет очень сложную функциональную зависимость от значения параметров β и γ .

Можно записать коэффициент интенсивности волны, распространяющейся в кристалле:

$$4\pi t A = \frac{1}{\sqrt{2|c_{gr}''(ak^*)|}}$$
 (53)

Обратим внимание на то, что выражение (53) также имеет особую точку, соответствующую случаю $c_{gr}^{\prime\prime}(ak)=0.$

Зависимости скорости и коэффициента интенсивности волн, распространяющихся в среде, представляют собой сложные функции параметров β и γ . Чтобы сделать выводы о влиянии взаимодействий частицы с третьей координационной сферой, рассмотрим срезы зависимости скоростей всех трёх волн в зависимости от значения силы взаимодействия частицы с третьей координационной сферой при фиксированном относительном значении взаимодействий между частицей и её первой и второй сферой. Важно обратить внимание, что увеличение γ ведёт к уменьшению силы взаимодействий между

первой и второй сферой, то есть неизменный β в первую очередь отвечает за характер распределения жёсткости между первой и второй сферами.

На рисунках 2.2.7 и 2.2.8 показано, сколько волн и с какой скоростью будет распространяться в среде в зависимости от значения γ. При этом цвет кривой отражает величину коэффициента интенсивности волны. Выноски показывают численное решение задачи, полученное методом динамики частиц.

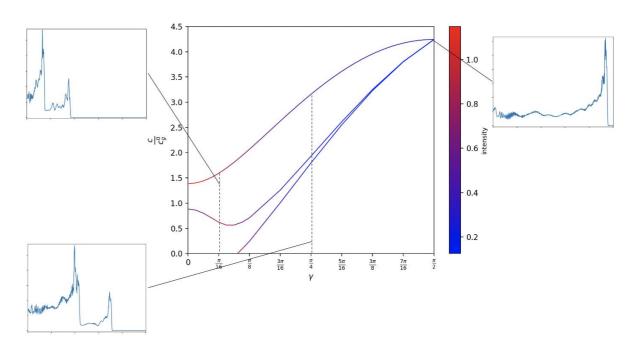


Рисунок 2.2.7. Скорость распространяющихся в среде волн при фиксированном значении $\beta = \frac{3\pi}{16}$

Посмотрим на рисунок 2.2.7. Видно, что при $\gamma=0$, то есть при отсутствии взаимодействия частиц с их третьей координационной сферой, в кристалле наблюдается две волны. При увеличении γ возникают взаимодействия между частицей и её третьими ближайшими соседями, что приводит к тому, что взаимодействия между частицей и второй координационной сферой ослабевают, и скорость одной из волн становится меньше. При этом взаимодействия с третьей координационной сферой недостаточно велики, чтобы появилась третья волна. Она начинает наблюдаться при определённом значении γ , близком к $\frac{\pi}{16}$.

С последующим увеличением γ скорость всех трёх волн будет увеличиваться, и в среде будет распространяться три волны. При $\gamma = \frac{\pi}{2}$ скорости всех трёх волн станут равными, и будет наблюдаться одна волна. Это состояние системы соответствует распространению тепла в кристалле с первой координационной сферой и утроенными равновесными расстояниями.

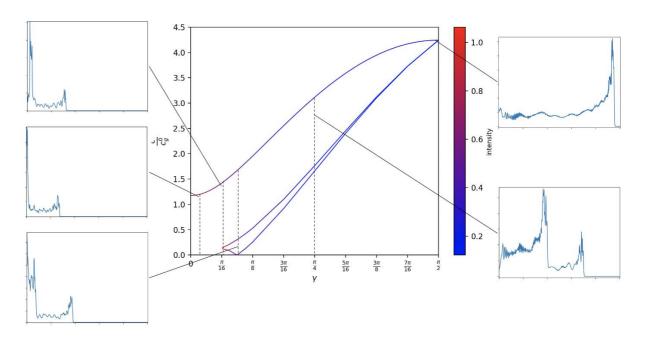


Рисунок 2.2.8. Скорость распространяющихся в среде волн при фиксированном значении $\beta = \frac{\pi}{16}$

Теперь посмотрим на рисунок 2.2.8, где рассмотрено другое значение параметра β . При $\gamma=0$ взаимодействия со второй координационной сферой настолько малы, что в кристалле распространяется только одна волна. Вторая и третья волны появляются одновременно, также при значении γ , близком к $\frac{\pi}{16}$.

При определённом значении параметра $\frac{\pi}{16} < \gamma < \frac{\pi}{8}$ скорость третьей волны будет равна нулю, и в среде вновь будет распространяться только две волны. Однако затем третья волна снова появится. Мы будем наблюдать увеличение скорости всех трёх волн до их единого значения при $\gamma = \frac{\pi}{2}$.

Коэффициенты интенсивности волн, что в первом, что во втором случае, ведут себя схожим образом: наибольшие величины наблюдаются при малых

значениях параметра γ . Они уменьшаются по мере того, как растёт скорость волн. Данное наблюдение соответствует законам логики.

Таким образом, можно сделать вывод, что при достаточно больших значениях параметров β и γ коэффициенты интенсивности волн зависят от характера взаимодействий частиц с их первой — третьей координационной сферами монотонным, почти линейным образом.

В следующем параграфе рассмотрим численное решение задачи теплопереноса.

2.3. Численное решение задачи о распространении тепла в кристалле

Рассмотрим теперь распространение тепла в кристалле с произвольной координационной сферой в случае, когда начальное тепловое возмущение описывается прямоугольным импульсом конечной ширины и длины T(x) = $T_0(\eta(x+l) - \eta(x-l))$. Интеграл (33) посредством библиотеки SciPy. Метод, используемый функцией quad, при помощи которой были посчитаны интегралы, - метод Кленшоу-Куртиса [3]. Данный метод предполагает замену исходной таким образом, переменной ЧТО интеграл сводится К нахождению коэффициентов ряда Фурье. Этот алгоритм является адаптивным, так как варьируется количество слагаемых в рассматриваемом ряду. При этом его быстрая отличает сходимость сравнимую И точность, другими распространёнными методами численного интегрирования.

Результат вычислений для различных значений параметра γ при фиксированном $\beta = \frac{\pi}{16}$ представлен на рисунке 2.3.1. В случае $\gamma = 0$, то есть отсутствия взаимодействий между частицами и их третьей координационной сферой, наблюдается две волны. Когда параметр γ становится отличным от нуля, то есть появляются дополнительные взаимодействия, в кристалле появляется третья тепловая волна. При этом при малых значениях параметра γ она не ярко выражена, но при увеличении значения становится более заметной.

Также наблюдается увеличение скорости распространения тепла при увеличении γ .

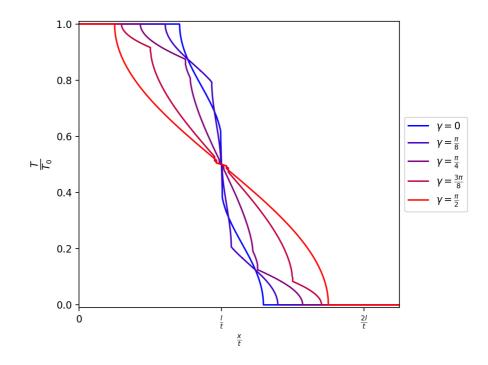


Рисунок 2.3.1. Распространение тепла в кристалле при фиксированном значении $\beta = \frac{\pi}{16}$

Происходит перераспределение энергии, поэтому третья волна растёт за счет двух волн, распространяющихся в среде при отсутствии взаимодействий с третьей координационной сферой. Важно отметить, что при $\gamma = \frac{\pi}{2}$ в среде вновь наблюдается одна волна. Это соответствует тому, что мы говорили при рассмотрении данного предельного случая в параграфе 2.1.

На рисунке 2.3.2 показано изменение температурного профиля в кристалле с третьей координационной сферой в зависимости от значения параметра β , отвечающего за характер взаимодействий между частицей и первой и второй координационными сферами.

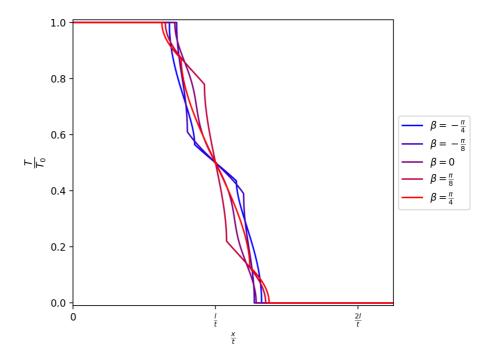


Рисунок 2.3.2. Распространение тепла в кристалле при фиксированном значении $\gamma = \frac{\pi}{16}$

Как видно из графиков, координата по оси абсцисс основного фронта меняется незначительно, происходит перераспределение энергии между волнами и изменение их интенсивности. Также меняются скорости второстепенных волн.

Данные результаты полностью соответствуют выводам, сделанным в предыдущем параграфе.

Сделаем выводы по задаче нестационарного теплопереноса в кристалле с третьей координационной сферой и нефиксированным характером взаимодействия частиц. При введении взаимодействий между частицей и её третьей координационной сферой, в среде, моделируемой при помощи цепочки связанных гармонических осцилляторов, могут распространяться от одной до трёх волн. Количество и характеристики волн существенно зависят от значения параметров β и γ .

Существует область значений параметра γ , которая зависит от β и при которых в кристалле наблюдается распространение трёх волн. Увеличение значения относительной силы взаимодействия с третьей координационной сферой приводит к увеличению скорости волн.

При малых значениях параметров β и γ характер зависимости нелинейный и немонотонный, наблюдаются локальные экстремумы. В среде распространяется от одной до двух волн, что определяется силой взаимодействий между частицей и её первой и второй координационными сферами.

Коэффициенты интенсивности волн, распространяющихся в среде, зависят от характера взаимодействий схожим образом. При достаточно больших значениях параметров β и γ зависимость принимает практически линейный вид. Увеличение силы взаимодействий приводит к уменьшению коэффициента интенсивности.

Данные результаты подтверждаются как аналитическими выкладками, так и численным решением задачи нестационарного теплопереноса.

ГЛАВА 3. РАСПРОСТРАНЕНИЕ ТЕПЛА В КРИСТАЛЛЕ С ВАРИАТИВНОЙ КООРДИНАЦИОННОЙ СФЕРОЙ С ФИКСИРОВАННЫМИ ЖЁСТКОСТЯМИ

3.1. Дисперсионное соотношение и групповая скорость

Рассмотрим одномерный бесконечный кристалл с N-ой координационной сферой, где N — переменная, которая может принимать целочисленные значения от 1 до 1000. Жёсткость пружин, соединяющих частицу с её i-ым соседом, описывается формулой $c_i = \frac{1}{i^4}$. На рисунках 1.3.1, 1.3.3 и 1.5.1 представлены некоторые возможные модели.

Поведение n-ой частицы описывается вторым законом Ньютона. На частицу действуют упругие силы со стороны других частиц, с которыми присутствует связь посредством пружин. Уравнение динамики n-ой частицы записывается следующим образом:

$$m\ddot{u}_n = \sum_{i=1}^N F_{n,n-i} = \sum_{i=1}^N \frac{1}{i4} (u_{n+i} - 2u_n + u_{n-i})$$
 (54)

Для решения уравнения (54) используем описание отклонения частицы от положения её равновесия в виде волновой функции Блоха: $u_n = Ae^{i(akn+\Omega t)}$, как и в предыдущем случае. Использование данного анзатца позволяет определить дисперсионное соотношение и групповую скорость:

$$\Omega = \pm \frac{2}{\sqrt{m}} \sqrt{\sum_{i=1}^{N} \frac{1}{i^4} \sin^2\left(\frac{i}{2}ak\right)}$$
 (55)

$$c_{gr} = \frac{a}{m\Omega} \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{i^3} \sin(iak)$$
 (56)

Как видно на рисунке 3.1.1, дисперсионное соотношение для таких значений жёсткостей, представляет собой монотонно возрастающую функцию, достигающую своего максимума в точке $ak=\pi$.

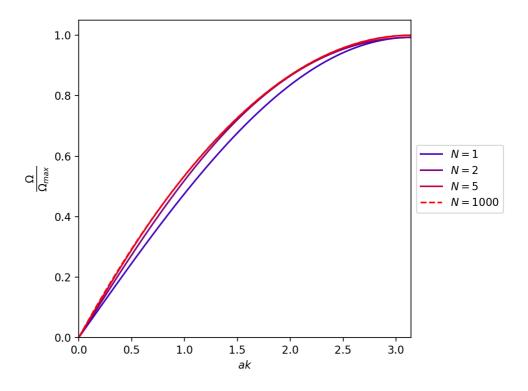


Рисунок 3.1.1 Дисперсионные соотношения при различных значениях параметра N

Можно вывести аналитическую формулу, описывающую зависимость максимального значения частоты от номера координационной сферы N:

$$\Omega_{max}(N) = \sqrt{\sum_{i=1}^{N^*} \frac{1}{(2i-1)^4}}$$
 (57)

где $N^* = Int\left(\frac{N}{2}\right)$. На основе данного выражения можно сделать вывод о том, что максимальная частота волн, способных распространяться в свободной среде с заданными параметрами, меняется не непрерывно, а скачкообразно, с шириной каждого шага равной двум. Это связано с тем, что при чётных значениях i при суммировании компонента в точке $ak = \pi$ будет равна нулю, то есть вклад будет только от нечётных координационных сфер. Можно определить максимально возможное значение, к которому будет стремится величина при $N \to \infty$:

$$\Omega_{max}^{\infty} = \frac{\pi^2}{\sqrt{24m}} \tag{58}$$

Так как свойства пружин, соединяющих частицы различных координационных сфер, убывают с возрастанием номера сферы, можно

предположить, что влияние каждой последующей сферы меньше влияния первых, и поведение волн в кристалле в первую очередь определяет взаимодействие нескольких ближайших соседей. Эта гипотеза подтверждается тем, что при достаточно больших значениях параметра N изменения в максимальном значении дисперсии становятся небольшими (рисунок 3.1.2).

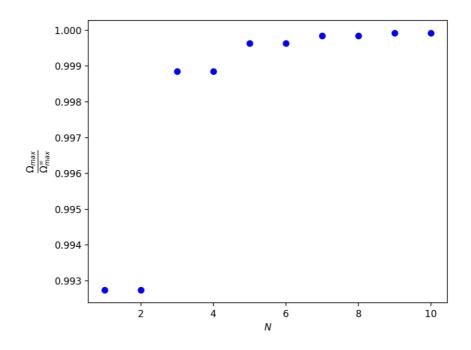


Рисунок 3.1.2. Максимальное значение частоты при различных значениях параметра N

Важно отметить, что максимальное значение частоты сходится к значению, наблюдаемую при бесконечной координационной сфере, очень быстро: уже при N=5 отличие составляет менее 0.1 процента.

Рассмотрим теперь групповые скорости для различных значений параметра N (рисунок 3.1.3).

Анализируя построенные кривые, делаем несколько выводов. Во-первых, максимальная групповая скорость представляет собой возрастающую функцию от N. Она достигается при $k \to 0$ для любой координационной сферы. Вовторых, кривая групповой скорости в зависимости от волнового числа при увеличении значения числа N выходит на асимптоту, представляющую собой линейную зависимость.

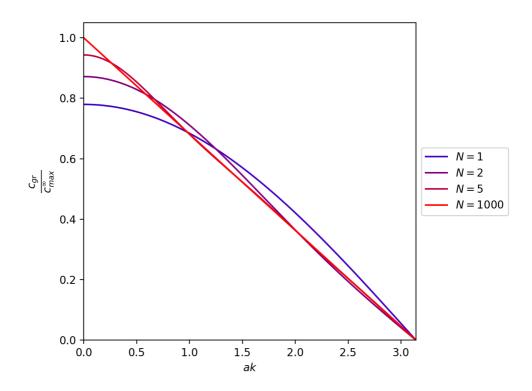


Рисунок 3.1.3. Групповая скорость при различных значениях параметра N

На рисунке 3.1.4 представлен график зависимости максимальной скорости от числа N. Установим теоретический вид данной зависимости. Для этого рассмотрим значение $k = \epsilon \to 0$. Воспользовавшись разложением в ряд Тейлора синуса в окрестности нуля, получим следующее приближение для дисперсионного соотношения и групповой скорости для N-ой координационной сферы:

$$\Omega(k=\epsilon) = \pm \frac{2}{\sqrt{m}} \sqrt{\sum_{i=1}^{N} \frac{1}{i^4} \left(\frac{ia\epsilon}{2}\right)^2} = \frac{a\epsilon}{\sqrt{m}} \sqrt{\sum_{i=1}^{N} \frac{1}{i^2}}$$
 (59)

$$c_{max}(N) = c_{gr}(k = \epsilon) = \frac{a}{m\Omega(k = \epsilon)} \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{i^3} ia\epsilon = \frac{a}{\sqrt{m}} \sqrt{\sum_{i=1}^{N} \frac{1}{i^2}}$$
 (60)

Ряд обратных квадратов сходится, поэтому можно точно определить максимальную групповую скорость распространения тепловой волны в одномерной бесконечной гармонической сплошной среде — кристалле с бесконечной координационной сферой (где все частицы взаимодействуют со всеми частицами):

$$c_{max}^{\infty} = c_{max}(N \to \infty) = \frac{a\pi}{\sqrt{6m}}$$
 (61)

При этом сходимость максимальной групповой скорости при некоторой координационной сфере к максимальной групповой скорости при сплошной среде происходит медленнее, чем сходимость максимального значения дисперсии: погрешность менее чем в 0.1~% наблюдается при N=30.

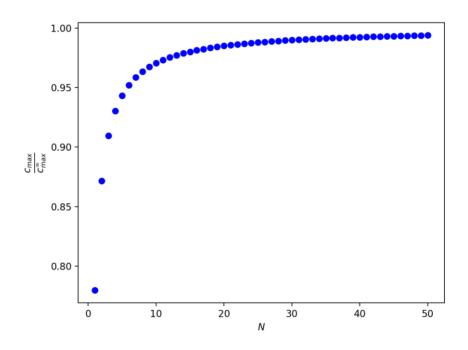


Рисунок 3.1.4. Максимальная групповая скорость как функция параметра N

График групповой скорости в случае бесконечно большого номера координационной сферы может быть описан следующей линейной функцией:

$$c^{\infty}(ak) = c_{max}^{\infty} \left(1 - \frac{ak}{\pi} \right) \tag{62}$$

Отметим, что говорить о распространении в среде одной волны было бы не совсем корректно: происходит распространение N волн, которые накладываются друг на друга таким образом, что их фронты совпадают.

3.2. Фундаментальное решение задачи о распространении тепла в кристалле

Построим приближенное фундаментальное решение задачи теплопереноса при начальном возмущении, равном дельта-функции $T_0(x) = T_0 \delta(x)$. Напомним, что фундаментальное решение записывается следующим образом:

$$T(x,t) = \frac{T_0}{4\pi t} \sum_{j} \frac{1}{|c'_{gr}(ak_j)|}$$
 (62)

где $c_{gr}'(ak_j)$ – первая производная групповой скорости по волновому числу, k_j – решения уравнений

$$\left|c_{gr}(ak_j)\right| = \frac{|x|}{t} \tag{63}$$

Обратим внимание на то, что групповая скорость, как упоминалось в предыдущем параграфе, представляет собой положительную монотонную убывающую функцию. Из этого следует, что уравнение (63) в данной задаче всегда будет иметь только один корень. Тогда выражение (62), с учётом выражения для первой производной, может быть переписано следующим образом:

$$T(x,t) = \frac{T_0}{4\pi t} \frac{\Omega}{\frac{a^2}{m} \sum_{i}^{N\cos(iak^*)} - c_{gr}^2}$$
 (64)

При этом будет наблюдаться N тепловых волн, фронты которых распространяются с одинаковой скоростью, соответствующей максимуму групповой скорости:

$$x_{fr}(t,N) = c_{max}(N) \cdot t \tag{65}$$

Так как мы уже определили, что значение максимальной групповой скорости увеличивается с увеличением номера координационной сферы N, то же самое можно сказать и про координату теплового фронта.

На рисунке 3.2.1 представлены профили температуры (выражение (64) при различных значениях параметра N. Видно, что температура в кристалле

представляет колебания вокруг равновесной температуры. При этом количество экстремумов кривой будет совпадать со значением параметра N (что соответствует количеству корней уравнения $c_{gr}^{\prime\prime}(ak)=0$).

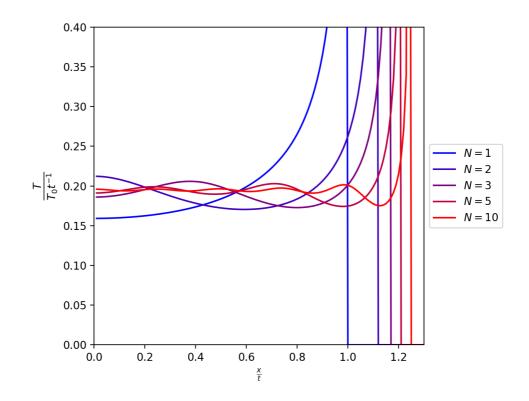


Рисунок 3.2.1. Фундаментальное решение задачи нестационарного теплопереноса для различных значений параметра N

Анализируя рисунок 3.2.1, мы предположили, что при устремлении номера координационной сферы к бесконечности профиль температуры в кристалле будет стремиться к прямоугольной форме. Это подтверждается при переходе к предельному случаю.

В случае, когда $N \to \infty$, групповая скорость может быть описана линейной функцией (формула (62)). Её производная на промежутке $k \in (0,\pi]$ будет равна константе, k=0 – особая точка. Получаем, что:

$$\frac{dc^{\infty}}{dk}(k \neq 0) = -c_{max}^{\infty} \frac{a}{\pi} = -\frac{a^2}{\sqrt{6m}}$$

$$\tag{66}$$

К этому же результату можно прийти и другим путём. Если устремить N к бесконечности в формуле (64), ответ будет выражаться через полилогарифмические функции. Значение при $k \in (0,\pi]$ будет совпадать с

выражением (66). Это подтверждают и анализ отдельных числовых рядов при различных значениях волнового числа.

Таким образом, распределение температуры может быть записано следующим образом:

$$T(t) = \begin{cases} \frac{T_0}{4\pi t} \frac{\sqrt{6m}}{a^2}, & |x| < c_{max}^{\infty} t \\ 0, & |x| > c_{max}^{\infty} t \end{cases}$$
 (67)

На рисунке 3.2.2 представлено фундаментальное решение задачи нестационарного теплопереноса в случае сплошной среды.

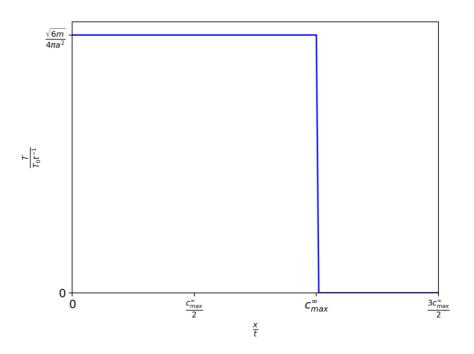


Рисунок 3.2.2. Фундаментальное решение задачи нестационарного теплопереноса при $N \to \infty$

При иных значениях *N* температурное распределение будет представлять собой затухающие колебания вокруг равновесного значения. Это можно легко объяснить тем, что, во-первых, конечная энергия распределяется между всё большим количеством взаимодействий; во-вторых, взаимодействия с ближайшими соседями более сильные, чем с дальними, поэтому на них уходит большая часть энергии.

Особый интерес представляет непосредственно точка фронта, в которой выражение (64) имеет особую точку ($c'_{gr}(ak_j) = 0$). Значение температуры в её окрестности может быть оценено посредством разложения групповой скорости и её первой производной в ряд Тейлора [16]:

$$T(x,t) = \frac{T_0}{4\pi t} \frac{1}{\sqrt{\zeta^* - \zeta}} \frac{1}{\sqrt{2|c_{gr}''(ak^*)|}}$$
(68)

где ζ^* - значение групповой скорости в особой точке, ζ — значение групповой скорости в окрестности особой точки. Важно понимать, что данное разложение справедливо только в небольшой окрестности точки k^* , то есть при $k \in [k^*, k^* + k_\delta]$, при этом k_δ уменьшается обратно пропорционально N. При $N \to \infty$ выражение (68) будет справедливо только непосредственно в точке фронта. Это соответствует тем выводам, что мы сделали при рассмотрении предельного случая.

Из выражения (68) видно, что поведение кривой в области особой точки зависит от второй производной групповой скорости при $k^* = 0$. Вторая производная может быть определена по следующей формуле:

$$c_{gr}^{"}(ak) = -\frac{1}{\Omega} \left[\frac{a^3}{m} \sum_{i=1}^{N} \frac{\sin(iak)}{i} + 3c_{gr}(ak) \frac{dc_{gr}}{dk}(ak) \right]$$
 (69)

Тогда в особой точке:

$$\left|c_{gr}^{"}(ak^*=0)\right| = \frac{a^3}{4\sqrt{m}} \frac{N}{\sqrt{\sum_{i=1}^{N} \frac{1}{i^2}}} = \frac{a^4}{4m} \frac{N}{c_{max}(N)}$$
 (70)

Анализируя выражение (70), можем сказать, что поведение фундаментального решения в окрестности теплового фронта имеет сложную функциональную зависимость от номера координационной сферы. При этом очевидно, что числитель дроби возрастает быстрей, чем знаменатель, что позволяет сделать вывод, что значение второй производной увеличивается при увеличении числа N.

Можно записать коэффициент интенсивности волны, распространяющейся в кристалле:

$$A = \frac{1}{4\pi t \sqrt{2|c_{gr}^{"}(ak^*)|}} = \frac{1}{2\sqrt{2}\pi t} \frac{\sqrt[4]{m\sum_{i=1}^{N} \frac{1}{i^2}}}{\sqrt{a^3N}}$$
(71)

На рисунке 3.2.3 представлена зависимость коэффициента интенсивности (формула (72)) от номера координационной сферы. Видно, что с увеличением значения номера координационной сферы коэффициент интенсивности волны уменьшается.

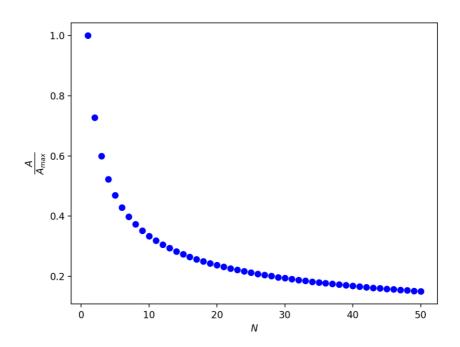


Рисунок 3.2.3. Коэффициент интенсивности волны как функция параметра N

Данный результат также соответствует тем выводам, что были сделаны выше. Важно понимать, что бесконечное уменьшение коэффициента интенсивности не означает стремление температуры в кристалле к нулю. Данное поведение свидетельствует о распределение конечной энергии между бесконечно большим числом волн.

3.3. Численное решение задачи о распространении тепла в кристалле

Был рассмотрен конкретный случай распространения тепла в кристалле с произвольной координационной сферой в случае, когда начальное тепловое возмущение описывается прямоугольным импульсом $T(x) = T_0 \big(\eta(x+l) - \eta(x-l) \big).$

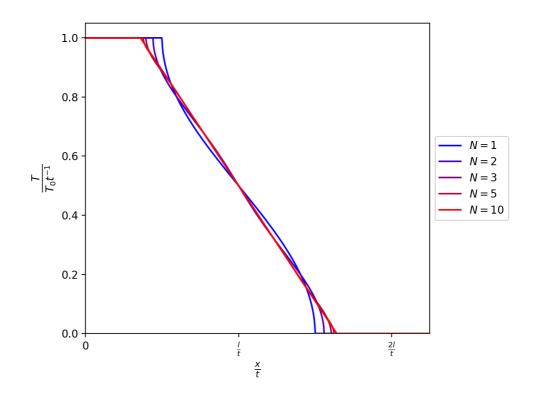


Рисунок 3.3.1. Распространение тепла в кристалле с *N*-ой координационной сферой

Результат вычислений представлен на рисунке 3.3.1. Анализ полученных результатов подтверждает выводы, сделанные в параграфе 3.2: в кристалле происходит распространение нескольких волн, распространяющихся с одинаковой скоростью, тем более высокой, чем больше значение номера координационной сферы.

В предельном случае $N \to \infty$ профиль температуры будет иметь форму трапеции.

При решении задачи о распространении тепла в кристалле с фиксированным характером взаимодействий и произвольным номером координационной сферы, было сделано несколько выводов.

Во-первых, было установлено, что наиболее сильное влияние на поведение частица оказывают её ближайшие соседи. Это связано с видом жёсткостей, заданных при постановке задачи. В связи с этим наибольшие изменения в характере распространения тепловых волн в кристалле происходят при изменении номера координационной сферы в диапазоне от 1 до 50.

Во-вторых, число волн, распространяющихся в кристалле, соответствует номеру координационной сферы, однако их распространение происходит единым фронтом, распространяющихся с максимальной групповой скоростью. Она увеличивается при возрастании номера координационной сферы пропорционально квадратному корню частичной суммы ряда обратных квадратов: $c_{max}(N) = \frac{a}{\sqrt{m}} \sqrt{\sum_{i=1}^{N} \frac{1}{i^2}}$. Коэффициент интенсивности волн уменьшается при увеличении номера координационной сферы;

В-третьих, в предельном случае, соответствующем значению N, стремящемуся к бесконечности, график групповой скорости сходится к линейной убывающей функции. Профиль температуры принимает вид прямоугольного импульса.

Распределение температуры в кристалле с N-ой сферой сходится к прямоугольному профилю. Описать распространение волны в кристалле с учётом бесконечно большого количества взаимодействий возможно без рассмотрения всех координационных сфер. Достаточно взять такое значение параметра N, для которого частичные суммы рядов сходятся к полной сумме с желаемой точностью.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной выпускной квалификационной работе были построены две математические модели идеального гармонического одномерного бесконечного кристалла со сложным характером взаимодействий. Теория идеальной кристаллической структуры направлена на установление взаимосвязи между микроскопическим поведением кристаллической системы, то есть характером колебаний частиц вокруг положений равновесия, и макроскопическими параметрами: упругими свойствами, электро- и теплопроводностью. В данной работе были рассмотрены нестационарные тепловые процессы в кристалле.

В первой части выпускной квалификационной работы была изучена и проанализирована литература по теме исследования. В результате работы с библиографическими источниками были выделены ключевые позиции гармонического приближения кристалла и модели Борна-фон-Кармана. Данный метод обладает неоспоримым преимуществом перед другими методами в виде теоретической простоты анализа поведения частиц в кристаллической структуре за счёт предположения о квазиупругом характере сил взаимодействия. Несмотря на то, что данный постулат приводит к ограничению области применимости модели, он позволяет провести количественный и качественный анализ структуры, что играет важную роль в задачах постепенного усложнения модели и включения в неё взаимодействий дальнего порядка.

Во второй главе был рассмотрен одномерный одноатомный кристалл с учётом третьей координационной сферы. С целью упрощения задачи количественного анализа системы была произведена параметризация и осуществлён переход от трёх жёсткостей к двум параметрам, характеризующим относительную силу взаимодействий. При введении третьей координационной сферы, в среде будет распространяться от одной до трёх волн в зависимости от значений параметров β и γ .

Построены фундаментальное и численное решения задачи теплопереноса для начального возмущения в виде дельта-функции и конечного прямоугольного

импульса соответственно. Был проведён количественный и качественный анализ скоростей и коэффициентов интенсивности волн. При слабых взаимодействиях между частицей и её третей координационной сферой в среде распространяется одна или две волны в зависимости от значения параметра β , то есть от характера сил, действующих со стороны первой и второй координационных сфер. С увеличением дальнодействующих сил количество волн в кристалле увеличивается до трёх. При этом часто наблюдается ситуация, когда скорость третьей волны сначала уменьшается до нуля, а потом начинает увеличиваться.

Увеличение γ при фиксированном значении параметра β , как показал анализ, приводит к увеличению абсолютного значения всех скоростей и сокращению влияния значения параметра β . Это свидетельствует об усилении взаимодействий с третей координационной сферой и ослаблению влияния первых и вторых ближайших соседей.

Коэффициенты интенсивности волн зависят от параметров относительной силы взаимодействия обратным образом: увеличение влияния третьей координационной приводит к уменьшению коэффициента интенсивности. Это соответствует физическим принципам: чем больше энергии уходит на разгон волны, тем меньше будет коэффициент её интенсивности.

В третьей главе выпускной квалификационной работы был исследован одномерный кристалл, состоящий из частиц одинаковой массы. с вариативной координационной сферой. Характер взаимодействий, рассматриваемый в данной модели, соответствует физической модели дипольного кристалла, в котором наиболее сильное влияние оказывают ближайшие соседи, а жёсткость связи убывает как $\frac{1}{i4}$, где i – номер соседа, с которым взаимодействует частица.

Наиболее сильные изменения в поведении системы, как показал анализ сходимости рядов для дисперсионных соотношений и групповых скоростей, происходят при значениях, меньших 20. Это подтверждает тот факт, что в кристаллических структурах первоочерёдную важность играют взаимодействия

ближнего порядка, а также свидетельствует о быстрой сходимости. Максимум групповой скорости при всех значениях номера координационной сферы достигается при волновом числе, равном нулю, и увеличивается пропорционально квадратному корню частичной суммы ряда обратных квадратов: $c_{max}(N) = \frac{a}{\sqrt{m}} \sqrt{\sum_{i=1}^{N} \frac{1}{i^2}}$.

Было найдено фундаментальное решение задачи о тепловом переносе. Оно позволило определить, что число волн, распространяющихся в кристалле, соответствует номеру координационной сферы, при этом их распространение происходит единым фронтом, а коэффициент интенсивности волн уменьшается при увеличении номера координационной сферы.

Был проанализирован предельный случай при N, стремящемся к бесконечности. График групповой скорости сошёлся к линейной убывающей функции с максимумом в k=0, а профиль температуры принял прямоугольный вид. Распределение температуры в кристалле с учётом конечного количества взаимодействий между соседями, сходится к прямоугольному профилю, соответствующему предельному случаю.

Был сделан следующий вывод: описать распространение волны в кристалле, в котором каждая частица взаимодействует со всеми остальными, можно, есть взять такое значение параметра N, для которого частичные суммы рядов сходятся к полной сумме с заданной в конкретной прикладной задаче точностью.

Таким образом, в данной выпускной квалификационной работе было решено две задачи о распространении тепла в кристалле со сложным характером взаимодействий между частицами. Все результаты, полученные в ходе аналитического решения, подтверждаются численным моделированием.

Результаты, полученные в этой работе, могут быть использованы как основа для последующих исследований в области теории идеальной кристаллической структуры и для анализа реальных систем.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Абгарян К. К., Колбин И. С. Расчёт теплопереноса в наноразмерных гетероструктурах / Известия ВУЗов. Материалы электронной техники, 2018. том 21. № 3. сс. 175–181
- 2. Бараз В. Р., Левченко В. П., Повзнер А. А. Строение и физические свойства кристаллов: учебное пособие / В. Р. Бараз, В. П. Левченко, А. А. Повзнер. Екатеринбург: УГТУ-УПИ, 2009. 164 с.
- 3. Беляев Н. Р., Танатаров И. В. Введение в теорию приближённых вычислений v. 0.6. 2011
- 4. Винтайкин Б. Е. Физика твёрдого тела. М: Издательство МГТУ имени Н. Э. Баумана, 2008. 360 с.
- 5. Гузев М. А. Закон Фурье для одномерного кристалла / Дальневосточный математический журнал, 2018. том 18. № 1. сс. 34–38
- 6. Гуняков В. А. и др. Термооптическое переключение в одномерном фотонном кристалле / Письма в ЖТФ, 2006. т. 32 № 21. с. 76
 - 7. Давыдов А. С. Теория твёрдого тела. М: Изд-во «Мир», 1979.-646 с.
- 8. Калистратова Л. Ф., Данилов С. В., Суриков В. И., Калистратова Н. П. Основы физики твёрдого тела. Конспект лекций. Омск: Изд-во ОмГТУ, 2010. 62 с.
- 9. Карпов С. И. Физика фононов. СПб: Санкт-Петербургский государственный университет. Физический факультет, 2006. 129 с.
- 10. Косевич А. М. О простой модели фотонного или фононного кристалла / Письма в ЖЭТФ, 2001. том 74. выпуск 11. сс. 633–637
- 11. Кривцов А. М. Деформирование и разрушение твёрдых тел с микроструктурой. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2007. 304 с.

- 12. Кривцов А. М. Динамика тепловых процессов в одномерных гармонических кристаллах / Вопросы математической физики и прикладной математики. Материалы семинара, приуроченного к 75-летию проф. Э. А. Троппа, 2015. СПб.: Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе, 2016. сс. 63–81
- 13. Кривцов А. М. Механика дискретных сред. Переходные тепловые процессы в гармонических кристаллах: учеб. пособие / А. М. Кривцов, В. А. Кузькин. СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2017. 90 с.
- 14. Кривцов А. М. Теоретическая механика. Упругие свойства одноатомных и двухатомных кристаллов: учеб. пособие. СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2009. 126 с.
- 15. Кривцов А. М., Кривцова Н. В. Метод частиц и его использование в механике деформируемого твёрдого тела / Дальневосточный математический журнал, 2002. том 3. № 2. сс. 254–276
- 16. Лобода О. С., Подольская Е.А., Цветков Д. В., Кривцов А. М. О фундаментальном решении задачи теплопереноса в одномерных гармонических кристаллах / Вычислительная механика сплошных сред, 2019. том 12. № 4. сс. 390—402
- 17. Марадудин А., Монтролл Э., Вейсс Дж. Динамическая теория кристаллической решётки в гармоническом приближении / перевод с английского И. В. Абаренкова, Е. Д. Трифонов, под ред. М. И. Петрашень. М: Изд-во «Мир», 1965. 384 с.
- 18. Морозов А. И. Физика твёрдого тела. Кристаллическая структура. Фононы. М: МГТУ МИРЭА, 2014. 171 с.
- 19. Мухин Н. В., Кутя М. М., Бородачева Е. С. Сенсорная структура на основе фононного кристалла, помещённого между пьезоэлектрическими преобразователями / Вестник РГРТУ, 2019. № 68. сс. 97—104

- 20. Неверова Е. В. Монокристаллический корунд как основа абразивных материалов / IX международный молодёжный форум «Образование. Наука. Производство». Белгород: Белгорродский государственный технологический университет им. В. Г. Шухова, 2017 сс. 52–56
- 21. Нелин Е. А. Устройства на основе фотонных кристаллов / Технология и конструирование в электронной аппаратуре. 2004. № 3. сс. 18—25
- 22. Соколов А. А., Кривцов А. М., Müller W. Н. Локализованные тепловые возмущения в одномерном гармоническом кристалле: решения уравнения аномальной теплопроводности / Физическая мезомеханика, 2017. № 3. сс. 63–68
- 23. Тимофеева М. В. Синтетические алмазы: производство, перспективы / Актуальные проблемы гуманитарных и естественных наук, 2014. № 4–3. сс. 143–145.
- 24. Ушакова Е. В. Введение в физику твёрдого тела: конспект лекций. Учебное пособие. – СПб: Университет ИТМО, 2015. – 97 с.
- 25. Харрисон У. Теория твёрдого тела / редактор Е. И. Майкова. М: Мир, $1972.-616~\mathrm{c}.$
- 26. Хмельницкий Р. А., Талипов. Н. Х., Чучева Г. В. Синтетический алмаз для электроники и оптики. М.: Издательство ИКАР, 2017. 228 стр.
- 27. Dhar A. Heat Transport in low-dimensional systems / Advanced in Physics, 2008. vol. 57 № 5
- 28. Krivtsov A. M. Heat transfer in infinite harmonic one dimensional crystals / Doklady Physics, 2015.
- 29. Krivtsov A. M. The Ballistic Heat Equation for a One-Dimensional Harmonic Crystal / Dynamical Processes in Generalized Continua and Structures, 2019. vol. 103, pp. 345-358.

- 30. Kuzkin V.A., Krivtsov A.M. An analytical description of transient thermal processes in harmonic crystals / Physics of the Solid State, 2017. vol. 59. № 5
- 31. Kuzkin V. A., Krivtsov A. M. Fast and slow thermal processes in harmonic scalar lattices / Journal of PhysicsCondensed Matter, 2017. vol. 29. 28 p.
- 32. Loboda O.S., Krivtsov A.M., Porubov A.V., Tsvetkov D.V. Thermal processes in a one-dimensional crystal with regard for the second coordination sphere. 2019, ZAMM. 13 p.
- 33. Loboda O. S., Podolskaya E. A., Tsvetkov D. V., Krivtsov A. M. On the fundamental solution of the heat transfer problem in one-dimensional harmonic crystals / Continuum Mechanics and Thermodynamics, 2020.
- 34. Peckham G. E. Phonon dispersion relations in crystals / Dissertation for the Ph.D. Degree, 1964. 135 p.
- 35. Podolskaya E. A., Krivtsov A. M., Tsvetkov D. V. Anomalous heat transfer in one-dimensional diatomic harmonic crystal / Materials Physics and Mechanics, 2018. N = 40. pp. 172 180
- 36. Rieder Z., Lebowitz J.L., Lieb E., Properties of a harmonic crystal in a stationary nonequilibrium state / J. Math. Phys, 1967 vol. 8, 1073
- 37. Shang H., Carbogno C., Rinke P., Scheffler M. Lattice dynamics calculations based on density-functional perturbation theory in real space /. Computer Physics Communications, 2017. Vol. 215. pp. 26 46
- 38. Sharma V. Popular theoretical models to study lattice dynamics / International Journal of Engineering Science invention, 2018. Vol. 7 Issue 5 Ver. II. pp. 54-55
- 39. Tong S. Y., Maradudin A. A. Normal Modes of a Semi-Infinite Ionic Crystal / Physical review, 1969. Vol. 181 № 3. pp. 1318 1335

ПРИЛОЖЕНИЕ А. Анализ методов количественного описания колебаний вокруг положений равновесия в идеальном кристалле

Таблица А.1. Преимущества и недостатков различных моделей гармонического кристалла

| Название метода | Преимущества | Недостатки |
|-----------------------------|---|---|
| Метод силовых постоянных | + Простой качественный анализ конкретных систем; + Основополагающий метод решения задачи о колебаниях | + Учитывает только взаимодействия с ближайшими соседями; Сложность вычисления констант для сложных систем |
| M F 1 | кристаллической решётки | |
| Модель Борна-фон- | Теоретическое | Ограниченность |
| Кармана | описание поведения | применения |
| | волн в системе; | температурами, |
| | Взаимосвязь между | существенно меньше |
| | изменениями | температуры |
| | параметров системы и | плавления; |
| | физическими | Возможная сложность |
| | свойствами | получаемых |
| | | аналитических |
| | | выражений при |
| | | рассмотрении слишком |
| | | сложных систем |

Продолжение таблицы А.1

| Название метода | Преимущества | Недостатки |
|------------------------------|--|---|
| Модель жёстких ионов | Описание процессов, происходящих в конечных и полубесконечных кристаллах | Не может быть применена для длинных волн; Даёт некорректный результат для диэлектрических констант кристалла в поле высокой частоты |
| Метод оболочек | Корректное описание процессов в кристаллах, находящихся в электрическом поле высокой частоты | Введение дополнительных неизвестных, усложнение системы уравнений |
| Теория функционала плотности | Позволяет описывать состояния и свойства систем, чьи теоретические описания затруднены; Сколь угодная точность | Численное решение задачи; Может потребовать большого количества вычислительных мощностей |