

## ЧЕБЫШЕВСКИЙ СБОРНИК

Том 18 Выпуск 3

УДК 539.3, 539.4

DOI 10.22405/2226-8383-2017-18-3-330-349

**НЕСТАЦИОНАРНЫЕ  
ТЕРМО-ДИФФУЗИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ  
В КОНЕЧНОМ ОДНОМЕРНОМ  
КРИСТАЛЛЕ<sup>1</sup>**А. М. Кривцов<sup>2</sup>, А. С. Мурачѐв<sup>3</sup>, Д. В. Цветков<sup>4</sup>  
(г. Санкт-Петербург)**Аннотация**

Рассматривается периодический одномерный гармонический кристалл, подвергнутый мгновенному пространственно-однородному тепловому воздействию. Строится точное решение для тепловых и диффузионных характеристик: дисперсии скоростей частиц (кинетической температуры) и дисперсии перемещений частиц. Выявляется квазипериодическое повторение тепловых и диффузионных процессов. Характерное время повторения равно половине времени пробега звуковых волн вдоль кристалла. С указанной периодичностью в системе реализуется “тепловое эхо” — резкие всплески кинетической температуры. Диффузионные характеристики обнаруживают крупномасштабные изменения во времени с практически полным возвращением в исходное состояние на каждом квазипериоде. Показано, что для квадратов перемещений частиц среднее по пространству существенно отличается от среднего по ансамблю.

*Ключевые слова:* Гармонический кристалл, неравновесная термодинамика, температура, диффузия.

*Библиография:* 23 названий.

<sup>1</sup>Исследование выполнено при частичной финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-29-15121.

<sup>2</sup>Кривцов Антон Мирославович, член-корреспондент Российской академии наук, заведующий кафедрой теоретической механики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, akrivtsov@bk.ru

<sup>3</sup>Мурачѐв Андрей Сергеевич, аспирант Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, andrey.murachev@gmail.com

<sup>4</sup>Цветков Денис Валерьевич, техник кафедры теоретической механики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, DVTsvetkov@ya.ru

# NON-STATIONARY THERMO-DIFFUSION PROCESSES IN FINITE ONE-DIMENSIONAL CRYSTAL

A. M. Krivtsov, A. S. Murachev, D. V. Tsvetkov (Saint-Petersburg)

## Abstract

A periodic one-dimensional harmonic crystal subjected to an instantaneous spatially uniform thermal perturbation is considered. Fast transitional and long evolutionary processes are observed. Time dependance of thermal and diffusion characteristics is analyzed. Influence of the crystal finite size on the transitional and evolutionary processes is considered. The principal difference in long time behavior for statistical averages for squares of velocities and squares of displacements is demonstrated.

*Keywords:* Harmonic crystal, nonequilibrium thermodynamics, temperature, diffusion.

*Bibliography:* 23 titles.

## 1. Введение

Точное аналитическое описание нестационарных тепловых и диффузионных процессов на молекулярном уровне представляет собой сложную задачу, на настоящее время имеющую решение лишь для ограниченного класса систем. Значительный прогресс в этой области достигнут для гармонических кристаллов [1, 2, 3, 4, 5, 6], в которых используются линеаризованные силы взаимодействия между атомами. Подобное приближение оправдано, если температуры далеки от температур плавления, а электронная подсистема не вносит существенного вклада в общую динамику кристаллической решетки. Эти условия естественным образом могут быть выполнены для ковалентных кристаллов. В данной работе на примере одномерного гармонического кристалла будет проведен анализ нестационарных тепловых и диффузионных процессов в конечных системах. Под тепловыми будут пониматься процессы, связанные со случайными скоростями, под диффузионными — со случайными перемещениями частиц кристалла.

Тепловые процессы в кристаллических телах могут быть разделены на быстрые и медленные [6], где быстрые процессы носят переходный характер и связаны с перераспределением энергии по степеням свободы, а медленные процессы связаны с переносом тепла. В данной работе мы ограничимся рассмотрением быстрых процессов, для которых состояние системы может считаться пространственно-однородным. Современные технологии генерации и измерения сверхкоротких лазерных импульсов [7, 8, 9] позволяют рассчитывать в ближайшем будущем на возможность экспериментального исследования подобных процессов. Дополнительно к тепловым будут рассматриваться сопутствующие диффузионные процессы. В гармоническом кристалле

не происходит изменения порядка частиц, так что диффузия как перемешивание частиц не реализуется. Однако, в результате теплового движения частица может уходить на значительные расстояния от своего начального положения, соответствующие диффузионные процессы достаточно сложны и существенно отличаются от тепловых. В частности, как будет показано ниже, для диффузионных процессов в пространственно однородном случае реализуются как быстрые, так и медленные процессы.

В связи с развитием нанотехнологий особую актуальность приобрело исследование систем, содержащих конечное число атомов [10, 11, 12, 13]. Термодиффузионные процессы в таких системах обладают рядом характерных особенностей, связанных с ограниченностью системы. В частности, в работе будет показано, что быстрые тепловые процессы в конечном кристалле периодически самопроизвольно возобновляются — возникает эффект “теплового эха”; медленные диффузионные процессы приводят к возвращению системы в исходное состояние за времена порядка пробега звуковых волн в кристалле.

## 2. Модель

Одномерные кристаллы (цепочки) представляют удобную модель для аналитического исследования термомеханических процессов в твердых телах [1, 14, 15, 16, 17, 18]. Динамика частиц одномерного гармонического кристалла в простейшем случае описывается уравнением

$$\ddot{u}_k = \omega_e^2 (u_{k-1} - 2u_k + u_{k+1}), \quad (1)$$

где  $\omega_e \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{C/m}$  — элементарная частота,  $m$  — масса частицы,  $C$  — жесткость связи,  $u_k$  — перемещение частицы с номером  $k$ . Будем считать, что для уравнения (1) выполняются условия периодичности

$$u_{k+N} = u_k, \quad (2)$$

где  $N$  — число частиц в кристалле. Условия (2) можно интерпретировать так, что одномерный кристалл замкнут в кольцо (условия Борна-Кармана [19]). В качестве начальных условий будем использовать условия теплового удара:

$$t = 0 : \quad u_k = 0, \quad \dot{u}_k = \sigma \rho_k, \quad (3)$$

где  $\rho_k$  — случайные величины,  $\sigma$  — дисперсия начальных скоростей частиц. Для случайных величин  $\rho_k$  выполняется:

$$\rho_{k+N} = \rho_k, \quad \langle \rho_k \rangle = 0, \quad \langle \rho_k \rho_{k+n} \rangle = \delta_n^N. \quad (4)$$

Здесь и далее: угловые скобки означают математическое ожидание,  $\delta_n^N = 1$  при  $n$  кратном  $N$  и  $\delta_n^N = 0$  в остальных случаях. Формулы (4) означают, что случайные величины периодичны по  $n$ , имеют нулевое матожидание и единичную дисперсию, а также они независимы при различии индексов менее, чем на  $N$  (иными словами, имеется  $N$  независимых случайных величин).

В силу линейности системы (1), перемещения и скорости имеют нулевое матожидание:

$$\langle u_k \rangle = 0, \quad \langle v_k \rangle = 0, \quad (5)$$

где  $v_k \stackrel{\text{def}}{=} \dot{u}_k$ . Обозначим

$$\bar{u} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N u_k, \quad \bar{v} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N v_k \quad (6)$$

— средние по пространству значения перемещений и скоростей частиц (здесь и далее черта сверху означает среднее по пространству). Очевидно, величины (6) от  $k$  не зависят и представляют собой скорость и перемещение центра масс системы. Для конечных  $N$  эти величины, в отличие от матожиданий (5), являются случайными и, вообще говоря, ненулевыми. Только при  $N \rightarrow \infty$  средние (6) стремятся к нулю. В этом состоит существенное отличие конечного и бесконечного кристаллов.

Введем центрированные перемещения и скорости

$$\tilde{u}_k \stackrel{\text{def}}{=} u_k - \bar{u}, \quad \tilde{v}_k \stackrel{\text{def}}{=} v_k - \bar{v}. \quad (7)$$

Данные величины, в отличие от  $u_k$  и  $v_k$ , являются материально-объективными: они не меняются при смещении центра масс системы. Диффузионные и тепловые процессы определяются, соответственно, дисперсиями центрированных перемещений и скоростей:

$$\langle \tilde{u}_k^2 \rangle, \quad \langle \tilde{v}_k^2 \rangle. \quad (8)$$

В частности, кинетическая температура одномерного кристалла определяется формулой

$$k_B T = m \langle \tilde{v}_k^2 \rangle, \quad (9)$$

где  $k_B$  — постоянная Больцмана. Согласно постановке задачи, величины (8)–(9) зависят от времени, но не зависят от пространственного индекса  $k$ .

Для описания нестационарных процессов будет использоваться метод, основанный на корреляционном анализе [1, 3, 4, 6, 20, 21]. Корреляционный анализ рассматривает детерминированные уравнения для статистических характеристик движения — ковариаций перемещений и скоростей частиц. Указанные уравнения замкнуты и позволяют получить аналитическое решение, включающее, в том числе, зависимости дисперсий (8) от времени.

### 3. Корреляционный анализ

Рассмотрим ковариации перемещений и скоростей:

$$\xi_n \stackrel{\text{def}}{=} \langle u_k u_{k+n} \rangle, \quad \kappa_n \stackrel{\text{def}}{=} \langle v_k v_{k+n} \rangle. \quad (10)$$

В силу однородности задачи, ковариации не зависят от индекса  $k$ , а зависят только от индекса  $n$ , определяющего расстояние между коррелирующими частицами. Из условий периодичности (2) следуют аналогичные условия периодичности для ковариаций:

$$\xi_{n+N} = \xi_n, \quad \kappa_{n+N} = \kappa_n. \quad (11)$$

Дифференцирование ковариаций с учетом уравнения динамики цепочки (1) приводит к замкнутой системе динамических уравнений для ковариаций. Наиболее простая форма может быть получена с использованием дополнительной переменной

$$\lambda_n \stackrel{\text{def}}{=} \kappa_n + \omega_e^2 (\xi_{n-1} - 2\xi_n + \xi_{n+1}). \quad (12)$$

Тогда начальной задаче (1)–(3) соответствует следующая начальная задача [3, 21]:

$$\ddot{\lambda}_n = 4\omega_e^2 (\lambda_{n-1} - 2\lambda_n + \lambda_{n+1}), \quad (13)$$

$$t = 0: \quad \lambda_n = \sigma^2 \delta_n^N, \quad \dot{\lambda}_n = 0. \quad (14)$$

Данная задача эквивалентна начальной задаче для одномерного кристалла (1), у которого в начальный момент времени смещена одна частица, а остальные неподвижны. Важное отличие начальной задачи (13)–(14) от исходной начальной задачи (1)–(3) состоит в том, что она описывает динамику детерминированных величин  $\lambda_n$ , в то время как исходная начальная задача описывает динамику стохастических величин  $u_k$ . Основная разница состоит в начальных условиях: в задаче (13)–(14) они детерминированы, в то время как в задаче (1)–(3) начальные условия стохастические.

Учитывая условия периодичности (11), задача (13)–(14) может быть решена как начальная задача для системы  $N$  линейных дифференциальных уравнений, что дает

$$\lambda_n = \frac{\sigma^2}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \cos q_k n \cos 2\omega_k t, \quad q_k \stackrel{\text{def}}{=} \frac{2\pi k}{N}, \quad \omega_k \stackrel{\text{def}}{=} 2\omega_e \sin \frac{\pi k}{N}. \quad (15)$$

После определения  $\lambda_n$  ковариации перемещений и скоростей находятся из соотношений:

$$2\kappa_n = \lambda_n + \sigma^2 \delta_n^N; \quad \ddot{\xi}_n = 2\lambda_n, \quad \xi_n|_{t=0} = 0, \quad \dot{\xi}_n|_{t=0} = 0; \quad (16)$$

а дисперсии центрированных перемещений и скоростей определяются значениями ковариаций при  $n = 0$ :

$$\langle \tilde{u}_k^2 \rangle = \xi_0 - \frac{\sigma^2 t^2}{N}, \quad \langle \tilde{v}_k^2 \rangle = \kappa_0 - \frac{\sigma^2}{N}. \quad (17)$$

Удобно выразить дисперсии через функцию  $\lambda(t) \stackrel{\text{def}}{=} \lambda_0 \equiv \lambda_n|_{n=0}$ :

$$\langle \tilde{u}_k^2 \rangle = 2\mathcal{I}^2 \lambda(t) - \frac{\sigma^2 t^2}{N}, \quad \langle \tilde{v}_k^2 \rangle = \frac{\lambda(t)}{2} + \frac{\sigma^2}{2} - \frac{\sigma^2}{N}, \quad (18)$$

где использован интегральный оператор

$$\mathcal{I}f(t) \stackrel{\text{def}}{=} \int_0^t f(\tau) d\tau. \quad (19)$$

Согласно [3] величина  $\lambda(t)$  пропорциональна лагранжиану  $\mathcal{L}$  (разности кинетической и потенциальной энергий системы):  $\mathcal{L} = \frac{mN}{2}\lambda(t)$ . Далее будем называть  $\lambda(t)$  приведенным лагранжианом. Из формулы (15) получаем

$$\lambda(t) = \frac{\sigma^2}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \cos 2\omega_k t, \quad \omega_k \stackrel{\text{def}}{=} 2\omega_e \sin \frac{\pi k}{N}. \quad (20)$$

Подстановка выражения (20) в соотношения (18) дает явные выражения для центрированных дисперсий

$$\langle \tilde{u}_k^2 \rangle = \frac{\sigma^2}{N} \sum_{k=1}^{N-1} \frac{\sin^2 \omega_k t}{\omega_k^2}, \quad \langle \tilde{v}_k^2 \rangle = \frac{\sigma^2}{N} \sum_{k=1}^{N-1} \cos^2 \omega_k t, \quad (21)$$

где частоты  $\omega_k$  определены формулой (20).

## 4. Тепловое эхо

Временные зависимости для диффузионных и тепловых процессов полностью определяются точными аналитическими зависимостями (21). Данные зависимости удобны для численных расчетов, однако их использование для аналитического анализа затруднено, так как при больших  $N$  (наиболее интересный с практической точки зрения случай) они содержат большое количество слагаемых. При этом слагаемые равноправны и нет возможности какой-то частью из них пренебречь. Существенно упростить аналитический анализ позволяет тождество

$$\frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \cos \left( z \sin \frac{\pi k}{N} \right) = J_0(z) + 2 \sum_{p=1}^{\infty} J_{2pN}(z), \quad (22)$$

где  $J_n(z)$  — функции Бесселя 1-го рода. Доказательство данного тождества приведено в приложении. С использованием тождества (22) формула (20) для  $\lambda(t)$  приобретает вид

$$\lambda(t) = \sigma^2 \left( J_0(4\omega_e t) + 2 \sum_{p=1}^{\infty} J_{2pN}(4\omega_e t) \right). \quad (23)$$

На первый взгляд может показаться, что формула усложнилась: сумма конечного числа элементарных функций заменяется бесконечной суммой специальных функций. Однако, это не так. Дело в том, что функции Бесселя

практически не отличаются от нуля, если значение аргумента меньше (с некоторым запасом), чем значение индекса. Поэтому во многих практически важных случаях формула (23) содержит лишь одно или несколько существенных слагаемых. Более того, при больших  $N$  наибольшие значения функции Бесселя реализуются при значениях аргумента, находящихся вблизи значения индекса. Этому соответствуют моменты времени

$$t = pt_*, \quad t_* \stackrel{\text{def}}{=} \frac{N}{2\omega_e}; \quad p = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (24)$$

Тогда в окрестности этих моментов времени в сумме (23) доминирует одно основное слагаемое, а остальные вносят лишь незначительный вклад.

Сказанное позволяет проанализировать диффузионные и тепловые процессы, описываемые формулами (18). Величину  $t_*$  будем называть квазипериодом указанных процессов. Хотя рассматриваемые процессы, строго говоря, не периодичны, но для них наблюдается определенная повторяемость с периодом  $t_*$ . Как будет показано далее, при некоторых условиях эти процессы могут восприниматься как периодические. Величина квазипериода имеет простую физическую интерпретацию:

$$t_* \stackrel{\text{def}}{=} \frac{N}{2\omega_e} = \frac{1}{2} \frac{L}{c_e}, \quad (25)$$

где  $L = Na$  — длина кристалла,  $c_e = \omega_e a$  — скорость звука,  $a$  — шаг кристаллической решетки. Таким образом, квазипериод — это время, за которое длинные (звуковые) волны проходят половину длины кристалла. За это время волны, расходящиеся от точечного источника, огибают кольцевой (периодический) кристалл и встречаются на его противоположной стороне — в этот момент резко возрастает амплитуда тепловых колебаний — реализуется “тепловое эхо”. Зависимость  $\lambda(t)$ , рассчитанная для миллиона частиц, представлена на рис. 1. Хорошо видны резкие увеличения амплитуды тепловых колебаний для  $t = t_*$  и  $t = 2t_*$ . Каждому из этих увеличений отвечает одно слагаемое в сумме (23) — соответствующая функция Бесселя, представляющая собой пакет из волн последовательно уменьшающейся амплитуды. Таким образом, физический смысл преобразования (22) состоит в том, что суммирование по труднонаблюдаемым собственным формам кристалла заменяется на суммирование по волновым пакетам, наблюдаемым как реализации “теплового эха”.

## 5. Бесконечный кристалл

При  $N \rightarrow \infty$  квазипериод  $t_*$  (24) стремится к бесконечности. В этом случае для конечных  $t$  в формуле (23) остается только первое слагаемое. Тогда из формул (18) получаем в пределе  $N \rightarrow \infty$ :

$$\langle \tilde{u}_k^2 \rangle = 2\sigma^2 \mathcal{I}^2 J_0(4\omega_e t), \quad \langle \tilde{v}_k^2 \rangle = \frac{\sigma^2}{2} \left( 1 + J_0(4\omega_e t) \right). \quad (26)$$

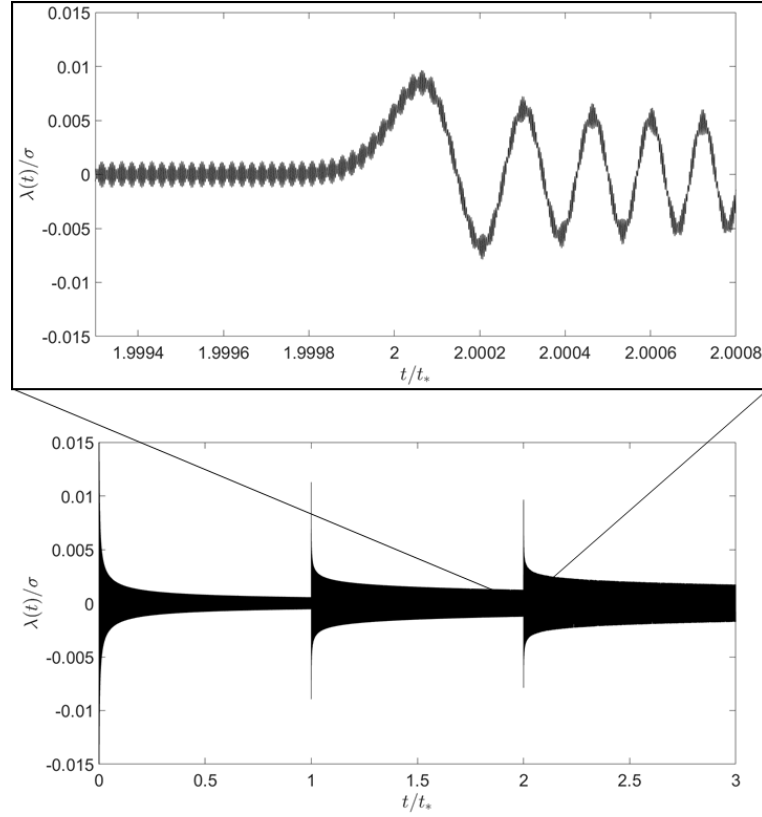


Рис. 1: Зависимость приведенного Лагранжиана от времени при  $N = 10^6$ . На выноске показаны колебания вблизи всплеска (разрешение по времени увеличено в 2000 раз).

Формула для  $\langle \tilde{v}_k^2 \rangle = k_B T / m$  была ранее получена в работе [3]. Вычисление дисперсии перемещений дает

$$\langle \tilde{u}_k^2 \rangle = \frac{\sigma^2}{8\omega_e^2} \mathcal{I}^2 \Phi(4\omega_e t), \quad \Phi(z) \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{I}^2 J_0(z), \quad (27)$$

где функция  $\Phi(z)$  выражается через функции Бесселя  $J_n$  и Струве  $H_n$  [22]:

$$\Phi(z) = z^2 J_0(z) - z J_1(z) + \frac{\pi}{2} z^2 \left( J_1(z) H_0(z) - J_0(z) H_1(z) \right). \quad (28)$$

График функции  $\Phi(z)$  представлен на рис. 2. Функция монотонно возрастающая, ее асимптотика при малых и больших  $z$  выглядит так:

$$z \ll 1 \Rightarrow \Phi(z) \simeq \frac{z^2}{2}, \quad z \gg 1 \Rightarrow \Phi(z) \simeq z. \quad (29)$$

Более точная асимптотика при больших  $z$ :

$$z \gg 1 \Rightarrow \Phi(z) \simeq z - J_0(z). \quad (30)$$

Таким образом, для бесконечного кристалла дисперсия перемещений — монотонно возрастающая функция времени, совершающая затухающие колебания



вблизи наклонной асимптоты. Начиная с некоторых времен рост дисперсии практически становится линейным, совпадая с асимптотой:

$$t \gg t_e \stackrel{\text{def}}{=} \frac{2\pi}{\omega_e} : \quad \langle \tilde{u}_k^2 \rangle \simeq \frac{\sigma^2}{2\omega_e} t. \quad (31)$$

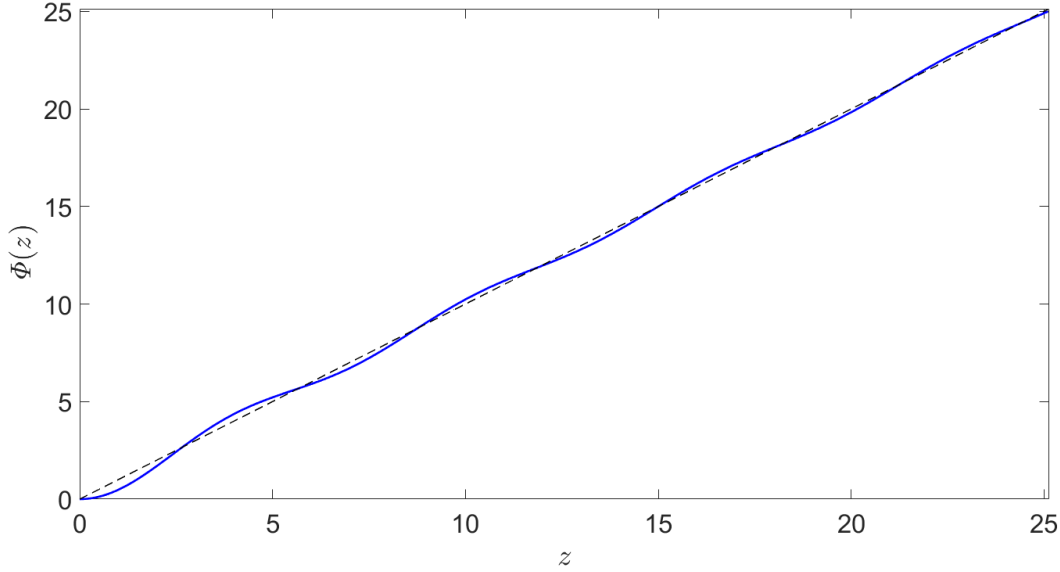


Рис. 2: График функции  $\Phi(z)$ , отображающий рост дисперсии перемещений в бесконечном кристалле. Пунктиром показана асимптота  $\Phi(z) \simeq z$ .

## 6. Первый квазипериод

Рассмотрим  $t \in [0, t_*]$ . В этом случае требуется учет двух первых слагаемых в представлении (23) для приведенного лагранжиана

$$\lambda(t) = \sigma^2 \left( J_0(4\omega_e t) + 2J_{2N}(4\omega_e t) \right), \quad (32)$$

что дает для дисперсий формулы

$$\langle \tilde{u}_k^2 \rangle = 2\sigma^2 \mathcal{I}^2 \left( J_0(4\omega_e t) + 2J_{2N}(4\omega_e t) \right) - \frac{\sigma^2 t^2}{N}, \quad (33)$$

$$\langle \tilde{v}_k^2 \rangle = \frac{\sigma^2}{2} \left( 1 + J_0(4\omega_e t) + 2J_{2N}(4\omega_e t) \right) - \frac{\sigma^2}{N}. \quad (34)$$

Здесь, в отличие от случая бесконечного кристалла, сохранены слагаемые  $\sim 1/N$ .

Из формулы (34) может быть получена простая асимптотическая формула для больших  $N$ . Воспользуемся следующими аппроксимациями: слагаемое

$2J_{2N}(4\omega_e t)$  не учитывается до приближения к моменту  $t = t_*$ , повторный интеграл от слагаемого  $J_0(4\omega_e t)$  заменяется линейной зависимостью (31). Тогда получаем:

$$\langle \tilde{u}_k^2 \rangle \simeq \frac{\sigma^2}{N} t (t_* - t), \quad \langle \tilde{v}_k^2 \rangle \simeq \frac{\sigma^2}{2} - \frac{\sigma^2}{N} \quad (35)$$

— дисперсия перемещений представляет собой квадратичную зависимость времени (перевернутая парабола), дисперсия скоростей постоянна. Наиболее существенные отклонения от этих законов будут наблюдаться на границах рассматриваемого интервала, однако чем больше число частиц в кристалле, тем менее заметными будут указанные отклонения. Сравнение точной и асимптотической формул для дисперсии перемещений представлено<sup>5</sup> на рис. 3.

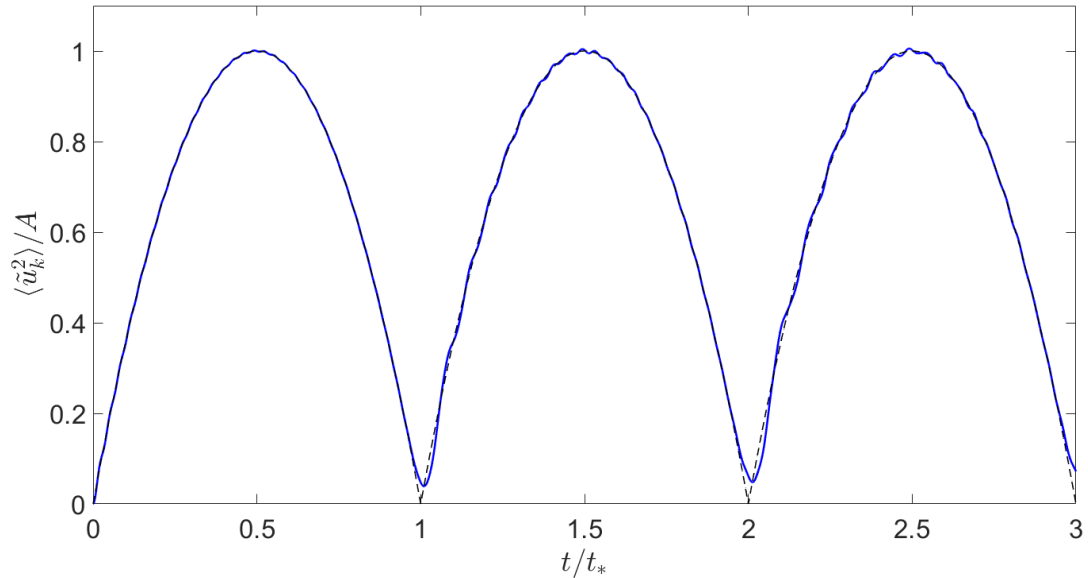


Рис. 3: Зависимость дисперсии центрированных перемещений от времени для  $N = 100$  (сплошная линия); предельная зависимость при  $N \rightarrow \infty$  (пунктир); обозначено:  $A \stackrel{\text{def}}{=} \sigma^2 t_*^2 / (4N)$  — максимальное значение дисперсии при  $N \rightarrow \infty$ .

Неожиданное следствие из формулы (35) состоит в том, что дисперсия перемещений обращается в ноль при  $t = t_*$ . Это означает, что в этот момент времени перемещения всех частиц в цепочке обращаются в ноль — она возвращается в исходное состояние. Время, которое для этого требуется, велико по микроскопическим меркам (много больше периодов атомарных колебаний), но отнюдь невелико по макроскопическим меркам — время за которое звук проходит половину длины кристалла. Конечно, этот результат неточный — формула (35) приближенная. Однако, она тем точнее, чем больше  $N$ , и

<sup>5</sup>Графики, представленные на рис. 3, могут быть получены в результате интегрирования в формуле (33), однако для численного расчета удобнее использовать формулу (21).

для достаточно протяженных кристаллов возвращение должно выполняться с высокой точностью. Результат напоминает теорему Пуанкаре о возвращении, но реализуется это возвращение за время на много порядков меньшее, чем предсказывается теоремой Пуанкаре.

Феномену обращения в ноль перемещений кристалла можно дать простое объяснение с точки зрения собственных форм (нормальных мод) колебаний кристалла. В макроскопическом (длинноволновом) приближении все собственные частоты кратны низшей частоте, соответствующей квазипериоду  $t_*$ . Это означает, что все собственные периоды укладываются целое число раз в квазипериод  $t_*$ , который, тем самым, становится периодом колебаний кристалла. Для точных уравнений высшие частоты уже не кратны низшей, однако это отклонение тем меньше сказывается, чем больше атомов содержит кристалл, и, соответственно, чем ближе система становится к макроскопической. Поэтому обращение перемещений в ноль тем более ярко выражено, чем длиннее рассматриваемый одномерный кристалл.

## 7. Асимптотика для больших $N$

Для больших  $z$  может быть использовано асимптотическое представление<sup>6</sup>

$$J_{2pN}(z) \simeq \delta(z - 2pN), \quad (36)$$

где  $\delta$  — дельта-функция Дирака,  $p$  целое неотрицательное число. Тогда

$$\lambda(t) \simeq \frac{\sigma^2}{4\omega_e} \left( \delta(t) + 2 \sum_{p=1}^{\infty} \delta(t - pt_*) \right), \quad (37)$$

где использовано, что для положительных  $a$  выполняется  $\delta(ax) = \delta(x)/a$ . Данное представление является периодическим и квазипериод  $t_*$  (25) выступает в качестве периода для функции (37). Для величины  $t_*$  выполняется  $t_* \sim N$  (25), поэтому для больших  $N$  формула (37) соответствует большим временам. В этом случае наибольшие значения функции Бесселя реализуются в окрестности моментов времени  $pt_*$ , где  $p = 0, 1, 2, 3, \dots$ , поэтому представление (37) может использоваться в качестве аппроксимации выражения (32) — см. рис.1.

Применение формулы (37) на открытом интервале  $(0, t_*)$  дает для дисперсий (18) формулы (35), только уже как асимптотически точные представления. На последующих временных интервалах продолжительностью  $t_*$

<sup>6</sup> Данное представление означает, что при соответствующем изменении масштабов по осям функция Бесселя будет стремиться к дельта-функции. Формально это можно выразить соотношением  $AJ_n(A(z-n) + n) \rightarrow \delta(z-n)$  при  $A \rightarrow \infty$ , где предел понимается в слабом (обобщенном) смысле. Для интегралов от функции Бесселя, которые потребуются для определения дисперсии перемещений, этот предел и соответствующая асимптотика могут уже рассматриваться в классическом смысле.

функции периодически повторяются. Результат можно представить в виде

$$\langle \tilde{u}_k^2 \rangle \simeq \sum_{p=0}^{\infty} f(t - pt_*), \quad \langle \tilde{v}_k^2 \rangle \simeq \sum_{p=0}^{\infty} \varphi(t - pt_*), \quad (38)$$

где функции на замкнутом интервале  $[0, t_*]$  определяются формулами

$$f(t) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\sigma^2}{N} t(t_* - t), \quad \varphi(t) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\sigma^2}{8\omega_e} \left( \delta(t) + \delta(t - t_*) \right) + \frac{\sigma^2}{2} - \frac{\sigma^2}{N} \quad (39)$$

и равны нулю вне указанного интервала.

Согласно представлению (38)–(39), при тепловом ударе после первоначального переходного процесса дисперсия скоростей (а значит, и температура) практически постоянна, за исключением моментов времени  $pt_*$ , в которых реализуются локализованные всплески: “тепловое эхо”. Их наличие связано с конечностью кристалла и определяется встречей упругих волн, сгенерированных начальным возмущением каждого атома. Эта встреча реализуется, когда волны огибают кристалл, поэтому соответствующее время  $t_*$  и равно времени, требуемому для звуковых волн, чтобы пройти половину длины кристалла (25). Согласно представлению (37) все всплески одинаковы. На самом деле, согласно точному выражению (32), они различаются. Можно показать, что высота каждого последующего всплеска ниже, а ширина больше — они как бы размываются, сохраняя при этом свою энергию. Согласно свойствам функций Бесселя, каждый всплеск представляет собой резко возникающие колебания, амплитуда которых затем затухает обратно пропорционально корню из времени.

Временная зависимость дисперсии перемещений, согласно (38)–(39), носит другой характер — рис. 3. После первоначального теплового удара дисперсия растет сперва линейно, потом рост ее замедляется, и при  $t = t_*/2$  достигается максимум

$$\langle \tilde{u}_k^2 \rangle_{\max} \simeq \frac{\sigma^2 t_*^2}{4N} = \frac{\sigma^2 N}{16\omega_e^2}. \quad (40)$$

Величина максимума дисперсии, согласно (40), пропорциональна  $N$ , значит максимальные перемещения относительно центра масс кристалла пропорциональны  $\sqrt{N}$ . После достижения максимума начинается симметричный спад дисперсии, приводящий к ее тождественному обращению в ноль при  $t = t_*$ . Затем дисперсия снова начинает расти и процесс повторяется. Такая картина наблюдается на больших, макроскопических временах. На малых, микроскопических, временах вблизи моментов времени  $t = pt_*$  реализуются переходные процессы. Формулы (38)–(39) описывают их просто как излом зависимости дисперсии от времени. Согласно точной формуле (32), переходные процессы представляют собой высокочастотный колебательный режим, наложенный на зависимость (38)–(39).

Отметим что в формулах (38)–(39) для достижения одинаковой точности для перемещений и скоростей требуются значения  $N$ , различающиеся на порядки. Так, согласно рис. 3, уже при  $N = 100$  наблюдается хорошее согласие

точной и асимптотической формул для дисперсии перемещений. Для дисперсии же скоростей даже при  $N = 10^6$  соответствующие графики все еще достаточно далеки от соответствующего асимптотического представления<sup>7</sup> — см. рис. 1. Это различие связано с тем, что переход от дисперсии скоростей к дисперсии перемещений осуществляется посредством двукратного интегрирования, а интегрирование сильно сглаживает зависимости. Обратный переход, напротив, требует двукратного дифференцирования, что приводит к сильному росту высокочастотной составляющей.

## 8. Сравнение средних по ансамблю и пространству

Описанные выше результаты для дисперсии перемещений относятся к математическому ожиданию квадрата перемещения, что эквивалентно осреднению по статистическому ансамблю. Для реальных систем этот результат соответствует осреднению по большому числу реализаций — экспериментов со сходными начальными условиями (одинаковыми статистически, но различными с точки зрения индивидуальных случайных значений). Для каждого конкретного эксперимента ситуация, вообще говоря, может быть отличной от той, которая была описана выше. Как показывают численные расчеты, и это может быть подтверждено аналитически, поведение среднего по пространству квадрата перемещений в каждом индивидуальном эксперименте очень сильно отличается от среднестатистической картины, даваемой формулами (38)–(39). Иллюстрация этого явления приведена<sup>8</sup> на рис. 4, где показаны временные зависимости величины

$$\{\tilde{u}_k^2\} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \tilde{u}_k^2 = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N (u_k - \bar{u})^2. \quad (41)$$

Здесь фигурные скобки означают осреднение по пространству (или, что в данном случае то же самое, по частицам). Далее, для краткости, будем называть величину  $\{\tilde{u}_k^2\}$  средним квадратом перемещений. Зависимости среднего квадрата перемещений от времени, представленные на рис. 4, получены в результате численного решения начальной задачи (1)–(3) для различных реализаций случайных начальных условий. В отличие от дисперсии  $\langle \tilde{u}_k^2 \rangle$ , которая является детерминированной величиной, средний квадрат перемещений  $\{\tilde{u}_k^2\}$  — величина случайная, и для разных реализаций получаются разные кривые. Зависимость  $\{\tilde{u}_k^2\}(t)$ , также, как и  $\langle \tilde{u}_k^2 \rangle(t)$ , приближается к нулю периодически при  $t = pt_*$  и практически повторяется в каждом новом квазипериоде. Однако, между обращениями в ноль, временная зависимость этой

<sup>7</sup> Согласно формуле (18), дисперсия скоростей связана линейно с приведённым лагранжианом (23), поэтому график на рис. 1 характеризует временную зависимость дисперсии скоростей.

<sup>8</sup> Соответствующие интерактивные графики представлены на сайте [tm.spbstu.ru/uu](http://tm.spbstu.ru/uu)

величины в разных экспериментах принимает различную форму, часто существенно отличающуюся от параболической. Максимальные значения могут сильно различаться (во много раз), а в рамках одного квазипериода может реализовываться несколько максимумов.

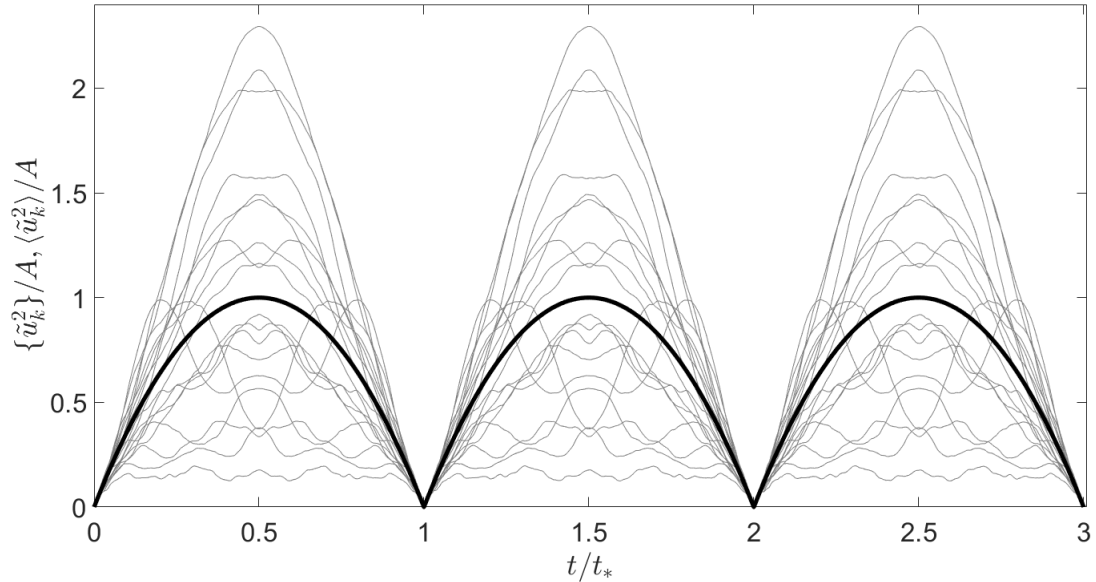


Рис. 4: Средний по пространству квадрат перемещений  $\{\tilde{u}_k^2\}$  для различных реализаций при  $N = 1000$  (тонкие линии); дисперсия перемещений  $\langle \tilde{u}_k^2 \rangle$  (жирная линия); обезразмеривающий множитель:  $A \stackrel{\text{def}}{=} \sigma^2 t_*^2 / (4N)$ .

Зависимость  $\langle \tilde{u}_k^2 \rangle(t)$  является математическим ожиданием зависимостей  $\{\tilde{u}_k^2\}(t)$ , то есть пределом при осреднении этих зависимостей по случайным реализациям начальных условий. Однако, зависимости  $\langle \tilde{u}_k^2 \rangle(t)$  не стремятся к  $\{\tilde{u}_k^2\}(t)$  при увеличении числа частиц. Даже для очень больших  $N$  средний квадрат перемещений  $\{\tilde{u}_k^2\}$  остается случайной величиной. Таким образом, для квадрата перемещений среднее по пространству и среднее по ансамблю существенно различаются. Отметим, что для скоростей ситуация иная: средний квадрат скоростей  $\{\tilde{v}_k^2\}$  при увеличении  $N$  стремится к детерминированной величине  $\langle \tilde{v}_k^2 \rangle$  — дисперсии скоростей, пропорциональной кинетической температуре кристалла. В этом состоит коренное отличие тепловых и диффузионных процессов.

## 9. Заключение

В работе рассмотрены процессы, возникающие в периодическом (кольцевом) одномерном кристалле при мгновенном тепловом воздействии, однородном по пространству. Получены точные временные зависимости для тепловых и диффузионных характеристик, таких как дисперсии скоростей и перемещений частиц. Наиболее значимые формулы: 21 — точные выражения для централизованных дисперсий скоростей и перемещений, удобные для

численного расчета; 22 — переход от суммирования по собственным формам к суммированию по волновым пакетам; 18, 23 — альтернативные выражения для дисперсий скоростей и перемещений, удобные для аналитического анализа; 27–28 — временная зависимость дисперсии перемещений для бесконечного кристалла; 38–39 — асимптотические выражения для дисперсий скоростей и перемещений при больших  $N$ .

В пределе бесконечного кристалла для тепловых характеристик реализуются затухающие колебания, описываемые функцией Бесселя — в соответствии с полученными ранее результатами [3]. Для диффузионных характеристик наблюдается неограниченный рост по закону, близкому к линейному — рис. 2.

В случае конечного кристалла колебания тепловых характеристик возобновляются через время, равное пробегу звуковой волны через половину длины кристалла — рис 1. Подобные всплески кинетической температуры могут интерпретироваться как “тепловое эхо”, связанное с тем, что упругие волны от возбужденной частицы оббегают кристалл и встречаются с противоположной стороны от точки их возникновения. С течением времени последовательные всплески теряют амплитуду, но увеличивают ширину, сохраняя содержащуюся в них энергию. Таким образом, в кристалле реализуются периодически повторяющиеся быстрые переходные процессы.

Для диффузионных характеристик, кроме аналогичных быстрых процессов, наблюдается также медленный процесс — рост дисперсии до величины, пропорциональной числу частиц, и последующим приближением дисперсии перемещений к нулю в момент очередного всплеска температуры — рис. 3. Таким образом, кристалл возвращается в состояние, близкое к исходному, за половину времени пробега звуковой волны через кристалл — период незначительный по макроскопическим масштабам. Чем больше частиц в кристалле, тем ярче выражен эффект возвращения и тем ближе закон изменения дисперсии к параболическому. Среднее значение квадрата перемещений по пространству отличается от статистического среднего по реализациям: первая величина является случайной (для любого числа частиц), вторая — детерминированной (см. рис. 4).

Таким образом, тепловые и диффузионные процессы в конечном кристалле значительно сложнее, чем в бесконечном. Диффузионные процессы в конечном кристалле, в свою очередь, сложнее, чем тепловые — они включают быстрые и медленные движения, средние по кристаллу сохраняют стохастическую природу даже при очень большом числе частиц. Наиболее значимые из обнаруженных эффектов: тепловое эхо (периодические всплески температуры), периодическое возвращение частиц системы в исходное положение, случайность среднеквадратического значения перемещений по пространству.

Обнаруженные эффекты могут наблюдаться при ультракоротком лазерном воздействии на наноструктуры. Они также могут служить базисом для описания более сложных процессов — тепло- и массопереноса в бездефектных кристаллах и наноструктурах.

Авторы благодарны Д. А. Индейцеву и В. А. Кузькину за полезные об-

суждения.

## СПИСОК ЦИТИРОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Rieder Z., Lebowitz J. L. and Lieb E. Properties of a harmonic crystal in a stationary nonequilibrium state. *J. Math. Phys.* 1967. vol. 8, pp. 1073–1078.
2. Dhar A. Heat Transport in low-dimensional systems. *Advanced in Physics.* 2008. Vol. 57, No. 5, pp. 457–537.
3. Кривцов А. М. Колебания энергий в одномерном кристалле. Доклады академии наук. 2014. том 458, № 3, С. 279–281.
4. Кривцов А. М. Распространение тепла в бесконечном одномерном гармоническом кристалле. Доклады академии наук. 2015. Т. 464, № 2, С. 162–166.
5. Thermal transport in low dimensions: from statistical physics to nanoscale heat transfer. Edited by S. Lepri. *Lecture notes in physics*, volume 921. Springer International Publishing, Switzerland. 2016. 418 p.
6. Kuzkin V. A., Krivtsov A. M. Unsteady heat transfer in harmonic scalar lattices. 2017. ArXiv:1702.08686.
7. Poletkin K. V., Gurzadyan G. G., Shang J., Kulish V. Ultrafast heat transfer on nanoscale in thin gold films. *Applied Physics B.* 2012. 107 (01), pp. 137–143.
8. Cartlidge E. European xfel to shine as brightest, fastest x-ray source. *Science.* 2016. Vol. 354, no. 6308, pp. 22–23.
9. Albertazzi B., Ozaki N., Zhakhovsky V. et al. Dynamic fracture of tantalum under extreme tensile stress. *Science Advances.* 2017. Vol. 3, no. 6.
10. Кривцов А. М., Морозов Н. Ф. О механических характеристиках наноразмерных объектов. *Физика твердого тела.* 2002. Т. 44. № 12. С. 2158–2163.
11. Гольдштейн Р. В., Морозов Н. Ф. Механика деформирования и разрушения наноматериалов и нанотехнологии. *Физ. мезомех.* - 2007. - Т. 10. № 5. С. 17-30.
12. Левин В.А., Левитас В.И., Лохин В.В., Зингерман К.М., Саяхова Л.Ф., Фрейман Е.И. Твердотельные фазовые переходы, вызванные действием механических напряжений в материале с наноразмерными неоднородностями. Модель и вычислительный эксперимент. Доклады Академии наук. 2010. Т. 434, № 4. С. 481–485.



13. Индейцев Д. А., Лобода О. С., Морозов Н. Ф., Скубов Д. Ю., Штукин Л. В. Автоколебательный режим нанорезонатора. *Физическая мезомеханика*. 2016. Т.19. № 5. С. 23-28.
14. Florencio J., Lee M. H. Exact time evolution of a classical harmonic-oscillator chain. *Phys. Rev. A*, 1985. Vol. 31, 3231.
15. Кривцов А. М. Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой. М.: Физматлит, 2007. 304 с.
16. Gendelman O. V., Savin A. V. Normal heat conductivity in chains capable of dissociation. *Europhys. Lett.* 2014. Vol. 106, 34004.
17. Savin A. V., Kosevich Y. A. Thermal conductivity of molecular chains with asymmetric potentials of pair interactions. *Phys. Rev. E*. 2014. Vol. 89, 032102.
18. Berinskii I. E., Slepyan L. I. How a dissimilar-chain system is splitting. Quasi-static, subsonic and supersonic regimes. 2017. arXiv:1704.00046v2.
19. Ашкрофт Н., Мермин Н. *Физика твердого тела*. 1979. Т.2. М.: Мир.
20. Krivtsov A. M. On unsteady heat conduction in a harmonic crystal. 2015. ArXiv:1509.02506.
21. 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. Тропша. 30 сентября 2015. СПб.: Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе, 2016. С. 63–81.
22. Янке Е., Эмде Ф., Лёш Ф. *Специальные функции: Формулы, графики, таблицы*. 1964. М.: Наука.
23. Абрамовиц М., Стиган И. *Справочник по специальным функциям. С формулами, графиками и математическими таблицами*. 1979. М.: Наука.

## REFERENCES

1. Rieder Z., Lebowitz J. L. and Lieb, E. Properties of a harmonic crystal in a stationary nonequilibrium state. *J. Math. Phys.* 1967. vol. 8, pp. 1073–1078.
2. Dhar A. Heat Transport in low-dimensional systems. *Advanced in Physics*. 2008. Vol. 57, No. 5, pp. 457–537.
3. Krivtsov A. M. Energy Oscillations in a One-Dimensional Crystal. *Doklady Physics*. 2014, Vol. 59, No. 9, pp. 427–430.

4. Krivtsov A. M. Heat transfer in infinite harmonic one dimensional crystals. Doklady Physics. 2015, Vol. 60, No. 9, pp. 407–411.
5. Thermal transport in low dimensions: from statistical physics to nanoscale heat transfer. Edited by S. Lepri. Lecture notes in physics, volume 921. Springer International Publishing, Switzerland. 2016, 418 p.
6. Kuzkin V. A., Krivtsov, A. M. Unsteady heat transfer in harmonic scalar lattices. 2017. ArXiv:1702.08686.
7. Poletkin K. V., Gurzadyan G. G., Shang J., Kulish V. Ultrafast heat transfer on nanoscale in thin gold films. Applied Physics B. 2012. 107 (01), pp. 137–143.
8. Cartlidge E. European xfel to shine as brightest, fastest x-ray source. Science. 2016. Vol. 354, no. 6308, pp. 22–23.
9. Albertazzi B., Ozaki N., Zhakhovsky V. et al. Dynamic fracture of tantalum under extreme tensile stress. Science Advances. 2017. Vol. 3, no. 6.
10. Krivtsov A. M., Morozov N. F. On Mechanical Characteristics of Nanocrystals. Physics of the Solid State. 2002. Volume 44, Issue 12, pp 2260–2265.
11. Goldstein R.V., Morozov N.F. Mechanics of deformation and fracture of nanomaterials and nanotechnology. Physical Mesomechanics. 2007. Vol 10, p. 5-6.
12. Levin V.A., Levitas V.I., Lokhin V.V., Zingerman K.M., Sayakhova L.F., Freiman E.I. Solid-state stress-induced phase transitions in a material with nanodimensional inhomogeneities: Model and computational experiment. Doklady Physics. 2010. Vol. 55, No. 10, pp. 507–511.
13. Indeitsev D.A., Loboda O.S., Morozov N.F., Skubov D.Yu., Shtukin L.V. Self-oscillating mode of a nanoresonator. Physical Mesomechanics. 2016. Vol.19. №5. pp. 23-28.
14. Florencio J., Lee M. H. Exact time evolution of a classical harmonic-oscillator chain. Phys. Rev. A, 1985. Vol. 31, 3231 p.
15. Krivtsov A. M. Deformation and fracture of solids with microstructureй. Moscow, Fizmatlit. 2007. 304 p. (In Russian).
16. Gendelman O. V., Savin A. V. Normal heat conductivity in chains capable of dissociation. Europhys. Lett. 2014. Vol. 106, p. 34004.
17. Savin A. V., Kosevich Y. A. Thermal conductivity of molecular chains with asymmetric potentials of pair interactions. Phys. Rev. E. 2014. Vol. 89, 032102.

18. Berinskii I. E., Slepyan L. I. How a dissimilar-chain system is splitting. Quasi-static, subsonic and supersonic regimes. 2017. arXiv:1704.00046v2.
19. Ashcroft N. W. and Mermin N.D. Solid State Physics. Holt, Rinehart and Winston. 1976. 847 p.
20. Krivtsov A. M. On unsteady heat conduction in a harmonic crystal. 2015. ArXiv:1509.02506.
21. Krivtsov A. M. Dynamics of thermal processes in one-dimensional harmonic crystals. Questions of mathematical physics and applied mathematics. - Proceedings of the seminar timed to the 75th anniversary of prof. E.A. Tropp. 30 September 2015. — SPb.: A.F. Ioffe Physico-Technical Institute , 2016. — pp. 63-81.
22. Yanke E., Emde F., Lesh F. Special functions: the formulas, graphs, tables. Science. 1964, Moscow, 344 p.
23. Abramowitz M. and Stegun I. A. Handbook of Mathematical Functions With Formulas, Graphs, and Mathematical Tables. New York: Dover. 1979. 1046 p.

## Приложение: доказательство тождества 22

Воспользуемся формулой [23]:

$$\cos(z \sin \theta) = \sum_{p=-\infty}^{\infty} J_{2p}(z) \cos(2p \theta), \quad (42)$$

где  $J_{2p}(t)$  — функции Бесселя первого рода. Произведем подстановку  $\theta = \pi k/N$ , где  $k = 0, 1, \dots, N-1$  и, просуммировав по  $k$ , получим:

$$\frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \cos \left( z \sin \frac{\pi k}{N} \right) = \sum_{p=-\infty}^{\infty} J_{2p}(z) S_N(p), \quad (43)$$

где

$$S_N(p) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \cos \left( p \frac{2\pi k}{N} \right). \quad (44)$$

Сумма косинусов кратных углов может быть вычислена через сумму экспонент, которая, в свою очередь, вычисляется как сумма геометрической прогрессии:

$$\sum_{k=0}^{N-1} \cos k\phi = \operatorname{Re} \sum_{k=0}^{N-1} e^{ik\phi} = \operatorname{Re} \left( \frac{e^{iN\phi} - 1}{e^{i\phi} - 1} \right). \quad (45)$$

Вычисление вещественной части (45) позволяет получить следующее представление:

$$\sum_{k=0}^{N-1} \cos k\phi = \frac{1}{2} \sin(N\phi) \operatorname{ctg} \frac{\phi}{2} + \sin^2 \frac{N\phi}{2}, \quad (46)$$

откуда находим

$$S_N(p) = \frac{\sin(2\pi p)}{2N} \operatorname{ctg} \frac{\pi p}{N} + \frac{\sin^2(\pi p)}{N}. \quad (47)$$

Анализ полученного выражения показывает, что для  $p$ , кратных  $N$ , оно равно единице, а для всех остальных целых  $p$  оно равно нулю. Иными словами,  $S_N(p) = \delta_p^N$ . Тогда для выражения 43 получаем окончательно:

$$\frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \cos \left( z \sin \frac{\pi k}{N} \right) = \sum_{p=-\infty}^{\infty} J_{2pN}(z) = J_0(z) + 2 \sum_{p=1}^{\infty} J_{2pN}(z), \quad (48)$$

где используется, что  $J_n(x) = J_{-n}(x)$  для всех целых  $n$ .

Получено 19.05.2017

принято в печать 14.09.2017