

## **Переход к тепловому равновесию в гармонической грани- центрированной кубической решетке**

С.Д.Ляжков, В.А.Кузькин

Рубрика: Тепловые свойства, Динамика решетки.

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, ул.

Политехническая 29, Санкт-Петербург, Россия

E-mail: [sergeiliazhkov@gmail.com](mailto:sergeiliazhkov@gmail.com)

## Переход к тепловому равновесию в гармонической границентрированной кубической решетке

С.Д.Ляжков, В.А.Кузькин

*Аннотация*

В работе рассматривается поведение кинетической температуры при переходе к тепловому равновесию в бесконечной гармонической границентрированной кубической решетке. В начальный момент времени частицы имеют нулевые перемещения и случайные начальные скорости. Начальное распределение температуры по пространству однородно. Начальные кинетические температуры, соответствующие различным пространственным направлениям, вообще говоря, не равны. В данной работе исследуются два быстрых процесса, которыми обусловлен переход к тепловому равновесию: выравнивание кинетической и потенциальной энергий и перераспределение температуры по пространственным направлениям. Показано, что равное распределение в общем случае не достигается. Получены формулы, описывающие поведения температуры. Колебания кинетической температуры, связанные с выравниванием кинетической и потенциальной энергий затухают обратно пропорционально  $t^{3/2}$ . Кроме того, поведение кинетической температуры не зависит от начального распределения кинетической энергии по пространственным направлениям. Показано, что аналитические результаты согласуются с результатами численного решения уравнения динамики решетки.

# 1 Введение

В современной физике описание тепловых процессов в твердых телах является одной из актуальных проблем. В частности, представляет интерес исследование процессов, происходящих при переходе к состоянию теплового равновесия [1]. Неравновесное состояние может быть вызвано, например, прохождением ударных волн [2], вследствие чего температура может проявлять тензорные свойства (кинетические энергии теплового движения атомов могут существенно различаться по направлениям), а также быстрым лазерным воздействием [3, 4].

При переходе к тепловому равновесию в системе происходят следующие физические процессы: перераспределение полной энергии между кинетической и потенциальной формами [5], перераспределение кинетической энергии по пространственным направлениям [6]. Удобной моделью, которая используется для описания перехода к тепловому равновесию является гармонический кристалл. Это кристаллическая решетка, состоящая из материальных точек, взаимодействующих посредством гармонических сил и совершающих линейные колебания.

Гармоническая модель кристалла используется для описания переходных тепловых процессов в работах [5, 6, 7, 8, 9]. Рассматривались начальные условия, при которых частицы имеют случайные начальные скорости и нулевые перемещения. Исследован переход к тепловому равновесию в случае, когда температуры подрешеток в начальный момент времени различны. Переход к тепловому равновесию описан на основе подхода, состоящего в использовании ковариаций скоростей и перемещений частиц. В частности, в работе [7] гармоническая модель кристалла рассмотрена на примере одномерной цепочки одинаковых частиц, взаимодействующих с ближайшими соседями. В статье [8] был рассмотрен одномерный кристалл, представляющую собой цепочку на упругом основании. В работе [6] процесс перехода к тепловому равновесию представлен на примере треугольной и квадратной решеток. В работе [9] выведены точные формулы для описания температуры в сложных решетках (содержащих произвольное число частиц). В качестве примера рассмотрены колебания одномерной цепочки с различными массами и жесткостями и поперечные колебания графена. Как известно, трехмерные кристаллические решетки не являлись объектами исследования переходных тепловых процессов.

В настоящей работе рассмотрим переход к состоянию теплового равновесия в гранцентрированной кубической (ГЦК) решетке. К примеру, ГЦК решеткой обладают также инертные газы в конденсированном состоянии, серебро и другие металлы [10].

## 2 Уравнения динамики решетки

Рассмотрим кристаллическую ГЦК решетку, состоящую из одинаковых частиц. Атомы лежат в центрах граней и вершинах кубов, плотно заполняющих пространство. Для идентификации частиц будем использовать их радиус-векторы в недеформированном состоянии. Рассмотрим частицу с радиус-вектором  $\mathbf{r}$ . Для нумерации всех частиц, соседних с ней, будет использоваться индекс  $\alpha$ ;  $\alpha = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \pm 4, \pm 5, \pm 6$ . Векторы, соединяющие частицу с радиус-вектором  $\mathbf{r}$  с соседней, обозначаются  $\mathbf{a}_\alpha$ . Векторы  $\mathbf{n}_\alpha = \mathbf{a}_\alpha/|\mathbf{a}_\alpha|$  в рассматриваемой решетке

имеют следующий вид:

$$\begin{aligned}
\mathbf{n}_{\pm 1} &= \pm(\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y)/\sqrt{2}, & \mathbf{n}_{\pm 4} &= \pm(\mathbf{n}_3 - \mathbf{n}_2), \\
\mathbf{n}_{\pm 2} &= \pm(\mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z)/\sqrt{2}, & \mathbf{n}_{\pm 5} &= \pm(\mathbf{n}_1 - \mathbf{n}_3), \\
\mathbf{n}_{\pm 3} &= \pm(\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_z)/\sqrt{2}, & \mathbf{n}_{\pm 6} &= \pm(\mathbf{n}_1 - \mathbf{n}_2),
\end{aligned} \tag{1}$$

где  $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$  — орты декартового базиса, направленные вдоль осей кубической симметрии [10]. Для радиус-вектора  $\mathbf{r}$  имеется следующее представление:

$$\mathbf{r} = a(A_1\mathbf{n}_1 + A_2\mathbf{n}_2 + A_3\mathbf{n}_3), \tag{2}$$

где  $a$  — равновесное расстояние;  $A_1, A_2, A_3$  — целые числа.

Ближайшие соседи соединены линейными пружинками. В работе [9] уравнения движения представлены в следующем виде:

$$m\ddot{\mathbf{u}}(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} \mathbf{C}_{\alpha}\mathbf{u}(\mathbf{r} + \mathbf{a}_{\alpha}), \tag{3}$$

где  $m$  — масса частиц;  $\mathbf{u}(\mathbf{r}) = (u_x, u_y, u_z)^{\top}$  — вектор-столбец, состоящий из компонент вектора перемещения частицы с радиус-вектором  $\mathbf{r}$ ;  $\top$  — знак транспонирования;  $\mathbf{C}_{\alpha}$  — матрицы, коэффициенты которых определяют вклад частицы номер  $\alpha$  в суммарную силу, действующую на рассматриваемую частицу. Матрицы  $\mathbf{C}_{\alpha}$  в ГЦК решетке представлены следующим образом:

$$\begin{aligned}
\mathbf{C}_1 = \mathbf{C}_{-1} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} c & c & 0 \\ c & c & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \mathbf{C}_2 = \mathbf{C}_{-2} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & c & c \\ 0 & c & c \end{pmatrix}, \\
\mathbf{C}_3 = \mathbf{C}_{-3} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} c & 0 & c \\ 0 & 0 & 0 \\ c & 0 & c \end{pmatrix}, & \mathbf{C}_4 = \mathbf{C}_{-4} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} c & -c & 0 \\ -c & c & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\
\mathbf{C}_5 = \mathbf{C}_{-5} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & c & -c \\ 0 & -c & c \end{pmatrix}, & \mathbf{C}_6 = \mathbf{C}_{-6} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} c & 0 & -c \\ 0 & 0 & 0 \\ -c & 0 & c \end{pmatrix}, \\
\mathbf{C}_0 &= -4c\mathbf{E},
\end{aligned}$$

где  $c$  — жесткость связи;  $\mathbf{E}$  — единичная матрица. Заметим, что матрицы  $\mathbf{C}_{\alpha}$  являются симметричными ( $\mathbf{C}_{\alpha} = \mathbf{C}_{\alpha}^{\top}$ ).

Начальные условия для перемещений и скоростей частиц имеют вид

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}) = 0; \quad \dot{\mathbf{u}}(\mathbf{r}) = \mathbf{v}_0(\mathbf{r}), \tag{4}$$

где  $\mathbf{v}_0(\mathbf{r})$  — вектор-столбец независимых случайных начальных скоростей с нулевым математическим ожиданием.

В следующем параграфе строится дисперсионное соотношение, которое далее используется для описания тепловых процессов.

### 3 Дисперсионное соотношение

В работе [6] показано, что для описания поведения температуры необходимо построить дисперсионное соотношение. Для получения дисперсионного соотношения,  $\omega(\mathbf{k})$ , сделаем следующую подстановку в уравнении (3):

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}) = \mathbf{A}e^{i(\omega t + \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})}, \quad i^2 = -1, \quad (5)$$

где  $\mathbf{A}$  — постоянный вектор;  $\mathbf{k}$  — волновой вектор, который представляется в следующем виде:

$$\mathbf{k} = \frac{1}{a} (\theta_s \hat{\mathbf{n}}_1 + \theta_p \hat{\mathbf{n}}_2 + \theta_n \hat{\mathbf{n}}_3), \quad (6)$$

где  $\theta_s, \theta_p, \theta_n \in [0; 2\pi]$ ;  $\hat{\mathbf{n}}_1, \hat{\mathbf{n}}_2, \hat{\mathbf{n}}_3$  — векторы сопряженного базиса, т.е.  $\mathbf{n}_i \cdot \hat{\mathbf{n}}_j = \delta_{ij}$ , где  $\delta_{ij}$  — символ Кронекера.

Получим однородную систему линейных уравнений относительно  $\mathbf{A}$ :

$$(\mathbf{\Omega} - \omega^2 \mathbf{E}) \mathbf{A} = 0, \quad \mathbf{\Omega} = -\frac{1}{m} \sum_{\alpha} \mathbf{C}_{\alpha} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_{\alpha}}, \quad (7)$$

где  $\mathbf{\Omega}$  — динамическая матрица решетки. Система (7) имеет нетривиальное решение при равенстве нулю определителя матрицы  $\mathbf{\Omega}$ . Подставляя (2) в (7), получим следующий вид элементов  $\mathbf{\Omega}$ :

$$\begin{aligned} \Omega_{11} &= f(\theta_s, \theta_n, \theta_p), & \Omega_{12} &= \Omega_{21} = g(\theta_s, \theta_n, \theta_p), & \Omega_{22} &= f(\theta_p, \theta_s, \theta_n), \\ \Omega_{13} &= \Omega_{31} = g(\theta_n, \theta_p, \theta_s), & \Omega_{33} &= f(\theta_n, \theta_p, \theta_s), & \Omega_{23} &= \Omega_{32} = g(\theta_p, \theta_s, \theta_n), \\ f(\theta_s, \theta_n, \theta_p) &= 2\omega_*^2 \left( \sin^2 \frac{\theta_s}{2} + \sin^2 \frac{\theta_n}{2} + \sin^2 \frac{\theta_n - \theta_p}{2} + \sin^2 \frac{\theta_s - \theta_p}{2} \right), \\ g(\theta_s, \theta_n, \theta_p) &= 2\omega_*^2 \left( \sin^2 \frac{\theta_s}{2} - \sin^2 \frac{\theta_n - \theta_p}{2} \right), & \omega_*^2 &= \frac{c}{m}. \end{aligned} \quad (8)$$

Из формул (8) следует, что матрица  $\mathbf{\Omega}$  — вещественная и симметричная. Тогда ее можно представить в следующем виде:

$$\mathbf{\Omega} = \mathbf{P} \mathbf{\Lambda} \mathbf{P}^{\top}, \quad \Lambda_{ij} = \omega_j^2 \delta_{ij}, \quad (9)$$

где  $\omega_j^2$  — собственные числа матрицы  $\mathbf{\Omega}$ ;  $\omega_j, j = 1, 2, 3$  — ветки дисперсионного соотношения;  $\mathbf{P}$  — ортогональная матрица поляризации [11], составленная из единичных векторов матрицы  $\mathbf{\Omega}$ .

Таким образом, задача построения дисперсионного соотношения сводится к нахождению собственных чисел матрицы  $\mathbf{\Omega}$ .

В следующем параграфе дисперсионное соотношение используется для описания тепловых процессов.

### 4 Колебания температуры. Тепловое равновесие

Рассмотрим бесконечное множество реализаций одного и того же кристалла. Кинетические температуры, соответствующие различным пространственным направлениям, в общем случае различаются. Поэтому тепловое состояние описывается матричной температурой. Введем матричную температуру  $\mathbf{T}$ :

$$k_B \mathbf{T} = m \begin{pmatrix} \langle \dot{u}_x^2 \rangle & \langle \dot{u}_x \dot{u}_y \rangle & \langle \dot{u}_x \dot{u}_z \rangle \\ \langle \dot{u}_x \dot{u}_y \rangle & \langle \dot{u}_y^2 \rangle & \langle \dot{u}_y \dot{u}_z \rangle \\ \langle \dot{u}_x \dot{u}_z \rangle & \langle \dot{u}_y \dot{u}_z \rangle & \langle \dot{u}_z^2 \rangle \end{pmatrix}, \quad (10)$$

где  $k_B$  — постоянная Больцмана.  $\langle \dots \rangle$  — математическое ожидание. Диагональные элементы матричной температуры характеризуют кинетические температуры, соответствующие различным пространственным направлениям.

Введем также кинетическую температуру  $T$ :

$$T = \frac{1}{3} \text{tr} \mathbf{T}. \quad (11)$$

В работе [9] показано, что поведение матричной температуры  $\mathbf{T}$  описывается следующей точной формулой:

$$\mathbf{T} = \int_{\mathbf{k}} \mathbf{P} \mathbf{T}' \mathbf{P}^\top d\mathbf{k}, \quad T'_{ij} = \frac{1}{2} \{ \mathbf{P}^\top \mathbf{T}_0 \mathbf{P} \}_{ij} (\cos((\omega_i - \omega_j)t) + \cos((\omega_i + \omega_j)t)), \quad (12)$$

где  $\mathbf{T}_0$  — начальное значение матричной температуры;  $\omega_j^2$  — собственные числа  $\mathbf{\Omega}$ . Здесь для краткости использована запись для интеграла по компонентам волнового вектора:

$$\int_{\mathbf{k}} \dots d\mathbf{k} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \dots d\theta_s d\theta_p d\theta_n. \quad (13)$$

Для определения кинетической температуры  $T$  вычислим след  $\mathbf{T}$  в формуле (12), используя выражение (11). В результате имеем:

$$T = \frac{T_0}{2} \left( 1 + \frac{1}{3} \sum_{j=1}^3 \int_{\mathbf{k}} \cos(2\omega_j(\mathbf{k})t) d\mathbf{k} + \frac{1}{3} \int_{\mathbf{k}} \sum_{j=1}^3 \frac{\{ \mathbf{P}^\top \text{dev} \mathbf{T}_0 \mathbf{P} \}_{jj}}{T_0} \cos(2\omega_j(\mathbf{k})t) d\mathbf{k} \right), \quad (14)$$

где  $T_0$  — начальное значение кинетической температуры.

Формула (12) в точности описывает изменение во времени матричной температуры. В работе [9] показано, что в переходе к равновесию реализуются два процесса: колебания кинетической температуры, связанные с переходом части энергии в потенциальную (формулы (14), (15)) и перераспределение кинетической температуры  $T$  по пространственным направлениям.

В случае, когда в начальный момент времени выполняется равное распределение кинетической энергии в решетке по пространственным направлениям, то  $\text{dev} \mathbf{T}_0 = 0$ , и формула (14) упрощается:

$$T = \frac{T_0}{2} + B_1 + B_2 + B_3, \quad B_j = \frac{T_0}{6} \int_{\mathbf{k}} \cos(2\omega_j(\mathbf{k})t) d\mathbf{k}. \quad (15)$$

Величины  $B_j$  определяют вклад веток дисперсионного соотношения в колебания температуры.

В формулах (14), (15) отклонение кинетической температуры от равновесного значения затухает обратно пропорционально  $t^{3/2}$ . Это можно показать, домножая  $T - \frac{T_0}{2}$  на  $t^{3/2}$  — получившаяся величина совершает незатухающие колебания. Более строгое обоснование асимптотики формул (14), (15) заключается в использовании метода стационарной фазы [12, 13]. В работе [9] показано, что с течением времени в бесконечном гармоническом кристалле устанавливается тепловое равновесие, при котором матричная температура не меняется.

На основе точного решения (12) в работе [9] выведена формула, определяющее равновесное значение матричной температуры на больших временах:

$$\mathbf{T}_{eq} = \frac{1}{6} \text{tr}(\mathbf{T}_0) \mathbf{E} + \frac{1}{2} \int_{\mathbf{k}} \mathbf{P} \text{diag}(\mathbf{P}^\top \text{dev} \mathbf{T}_0 \mathbf{P}) \mathbf{P}^\top d\mathbf{k}. \quad (16)$$

В следующем параграфе приводится сравнение аналитического и численного решений задач поведения температуры.

## 5 Сравнение аналитического и численного решений

Сравним аналитическое решение задачи поведения температуры в ГЦК решетке (формулы (12), (14), (15), (16)) с численным решением (интегрирование уравнения движения (13)). Пусть в начальный момент времени  $T_{11} = \frac{m}{k_B} \langle \dot{u}_x^2 \rangle \neq 0$ ,  $T_{22} = T_{33} = 0$ . Зависимость кинетической температуры, соответствующая рассматриваемому случаю, совпадает с зависимостями ее при следующих начальных условиях:  $T_{11} = 0, T_{22} \neq 0, T_{33} = 0$  и  $T_{11} = 0, T_{22} = 0, T_{33} \neq 0$ . Третье слагаемое в формуле (14), соответствующее перечисленным выше начальным условиям, равно нулю. Следовательно, распределение кинетической энергии в ГЦК решетке по пространственным направлениям в начальный момент времени не влияет на колебания кинетической температуры. Таким образом, поведение температуры  $T$  можно описать формулой (15).

Для проверки формул (12), (14), (15), (16) проводилось численное интегрирование уравнения динамики решетки ГЦК (3) методом Верле с шагом  $\tau = 10^{-3} \tau_*$ ,  $\tau_* = 2\pi \sqrt{m/c}$  при  $N = 32$ , где  $N$  — число частиц, расположенных вдоль стороны ячейки периодичности решетки. Начальные перемещения частиц равны нулю, скорости — независимые случайные величины, распределенные покомпонентно на промежутке  $[-v_0; v_0]$ , где  $v_0$  — амплитуда начальных скоростей. Проводилось осреднение данных по 15 реализациям. При расчете кинетической температуры по формулам (14), (15), (16) использовался метод ячеек с числом разбиений области интегрирования, равным  $N^3$ .

На рисунке 1 представлен процесс колебаний кинетической температуры, связанный с выравниванием кинетической и потенциальной энергий, на рисунке 2 — вклады веток дисперсионного соотношения  $B_1, B_2, B_3$  в зависимость кинетической температуры от времени. Каждой ветке  $B_j, j = 1, 2, 3$  соответствует характерная частота  $\omega_j$ .

На рисунке 3 показан результат моделирования поведения кинетических температур в ГЦК решетке, соответствующим направлениям  $x, y, z$ . В масштабе рисунка видно, что значения  $T_{22}$  и  $T_{33}$  совпадают. Отсюда можно сделать вывод, что при  $T_{11} \neq 0$  в начальный момент времени кинетические температуры в ГЦК решетке перераспределяются одинаково по направлениям  $y, z$ . Также из рисунка 3 видно, что решение нестационарной задачи (формула (14)) сходится к решению стационарной задачи (формула (16)). В итоге выражения для равновесных температур можно представить в следующем виде:

$$T_{11}^{eq} \approx 0.31 T_0, \quad T_{22}^{eq} = T_{33}^{eq} \approx 0.095 T_0. \quad (17)$$

В масштабе рисунков 1,2,3 видно, что аналитическое и численное решения совпадают. Значит, задача поведения температуры в ГЦК решетке решена с высокой точностью.

## 6 Заключение

В настоящей работе рассмотрен переход к тепловому равновесию в гармонической бесконечной ГЦК решетке. Рассмотрен случай, когда начальный момент нет равного распределения кинетической энергии по пространственным направлениям. Анализ формулы (11) показал, что начальное распределение не влияет на колебания кинетической температуры. Исследование асимптотики формулы (12) показывает, что колебания кинетической температуры затухают обратно пропорционально  $t^{3/2}$ . Формула (12) показывает, что в ГЦК решетке реализуется процесс выравнивания кинетической и потенциальной энергий.

На основе формулы (12), в точности описывающей изменение матричной температуры, исследовано перераспределение кинетической температуры по пространственным направлениям. Для этого рассмотрен случай, когда кинетическая температура по направлению  $x$  в начальный момент времени не равна нулю. Установлено, что кинетические температуры одинаково перераспределяются по направлениям  $y, z$ . Было показано, что в ГЦК решетке равного распределения температуры не происходит. Кинетические температуры по направлениям  $x, y, z$  довольно быстро стремятся к равновесным значениям, описываемыми с помощью формулы (16).

Все аналитические выкладки подкреплены сравнением с результатами численного интегрирования уравнений динамики решетки.

## Список литературы

- [1] J.C. Reid, D.J. Evans, D.J. Searles. Communication: Beyond Boltzmann's H-theorem: Demonstration of the relaxation theorem for a non-monotonic approach to equilibrium. *J. Chem. Phys.* **136**, 02110 (2012).
- [2] Holian B.L., Hoover W.G., Moran B., Straub G.K. Shock-wave structure via nonequilibrium molecular dynamics and Navier-Stokes continuum mechanics *Phys.Rev.A*, **22**, 2798 (1980).
- [3] N.A.Inogamov. Two-temperature thermodynamic and kinetic properties of transition metals irradiated by femtosecond lasers, *AIP Conf. Proc.* 1464, 593-608 (2012).
- [4] Ultrafast laser-induced order-disorder transitions in semiconductors, K. Sokolowski-Tinten, J. Bialkowski, D. von der Linde, *Phys. Rev. B* 51, 14186 (1995).
- [5] G. Klein and I. Prigogine, *Physica* 19, 1053 (1953).
- [6] V.A. Kuzkin, A.M. Krivtsov, *Phys. Solid State*, 59(5), 1051 (2017).
- [7] A.M. Krivtsov, *Dokl. Phys.*, Vol. 59, No. 9, pp. 427–430, (2014).
- [8] M.B. Babenkov, A.M. Krivtsov, D.V. Tsvetkov. *Phys. Mesomech.* Vol. 19, №1, pp. 60-67 (2016).
- [9] V.A. Kuzkin. Approach to thermal equilibrium in harmonic crystals with polyatomic lattice, 29. Arxiv:1808.00504 [cond-mat.stat-mech], (2018).



- [10] А.М.Кривцов. Упругие свойства одноатомных и двухатомных кристаллов. Учебное пособие, Издательство Политехнического университета, Санкт-Петербург, 115 с. (2008).
- [11] M.T. Dove, Introduction to lattice dynamics. Cambridge University Press, London, 1993
- [12] M.V. Fedoryuk. Russian Mathematical Surveys, 6(1), 65-115, (1971).
- [13] V.A. Tsaplin, V.A. Kuzkin, Lett. Mat., 8(1), 16-20, (2018).

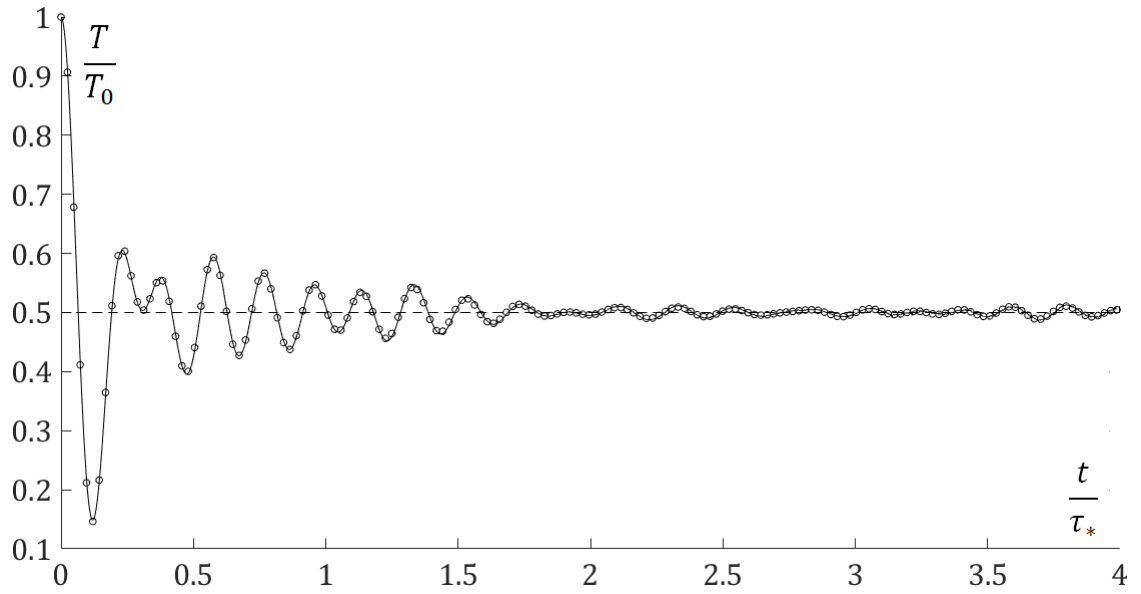


Рис. 1: Колебания кинетической температуры, связанные с выравниванием кинетической и потенциальной энергий в ГЦК решетке, со случайными начальными скоростями. Сплошная линия — аналитическое решение (12); круги — численное решение уравнения динамики ГЦК (3).

С.Д.Ляжков, В.А.Кузькин. Переход к тепловому равновесию в гармонической гранецентрированной кубической решетке.

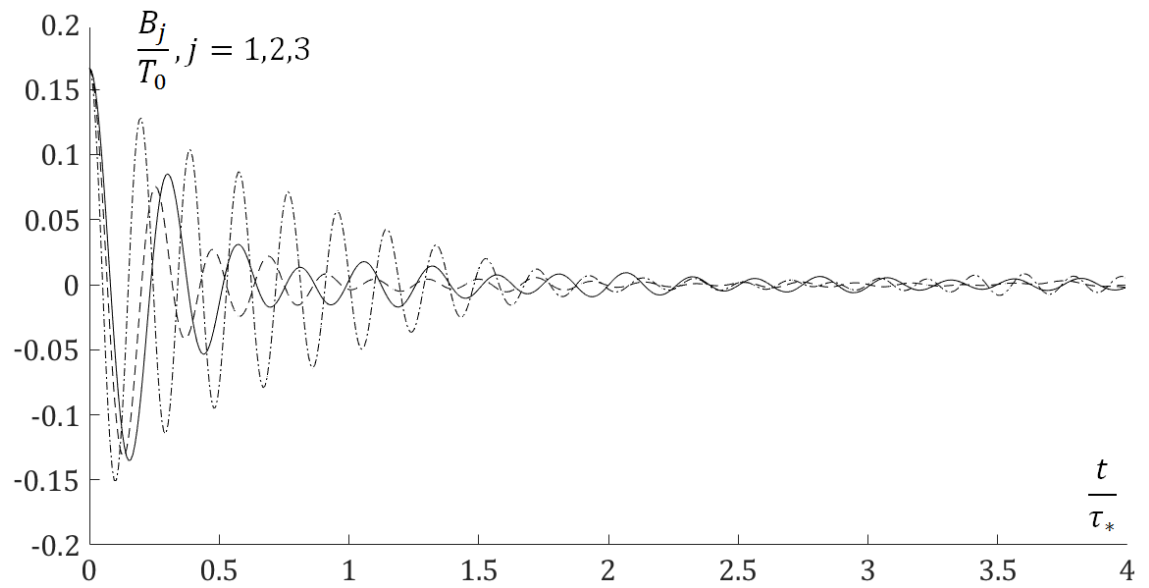


Рис. 2: Вклад трех веток  $B_1$  (сплошная линия),  $B_2$  (пунктирная линия) и  $B_3$  (штрихпунктирная линия) дисперсионного соотношения в зависимость кинетической температуры от времени. Каждой ветке  $B_j$  соответствует характерная частота.

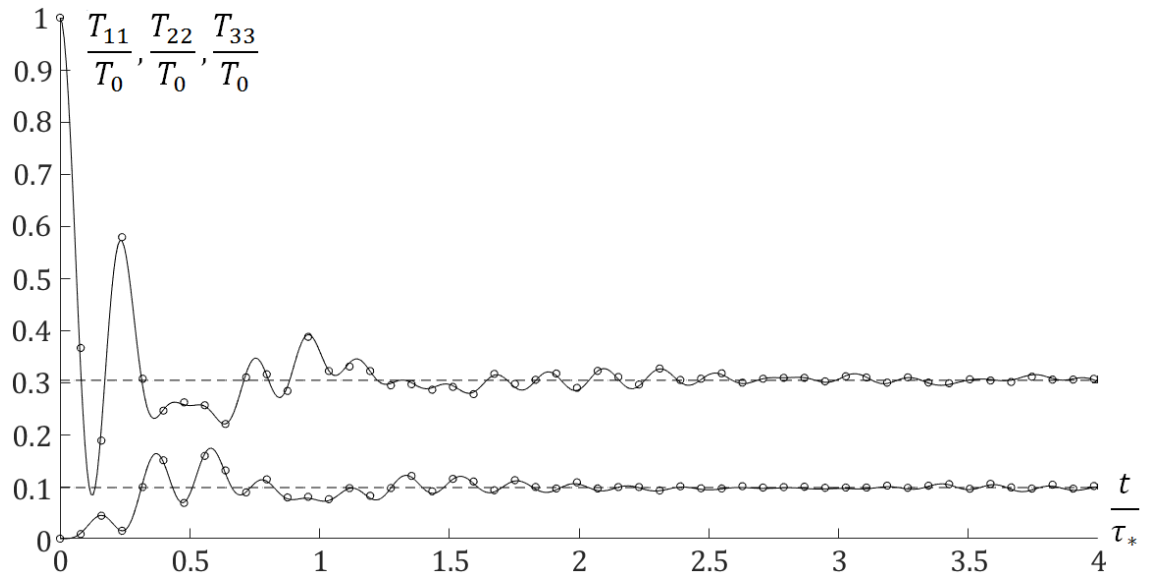


Рис. 3: Перераспределение кинетической температуры в ГЦК решетке по направлениям  $x$  (сплошная линия — аналитическое решение (9), круги — численное),  $y$  (пунктирная линия — аналитическое решение (9), круги — численное),  $z$  (линия и круги совпадают со значениями для  $y$ ). Начальные температуры —  $T_{11} \neq 0$ ,  $T_{22} = 0$ ,  $T_{33} = 0$ . Пунктирные линии соответствуют равновесным значениям кинетической температуры.

### Подписи к рисункам.

Рис.1: Колебания кинетической температуры, связанные с выравниванием кинетической и потенциальной энергий в ГЦК решетке, со случайными начальными скоростями. Сплошная линия — аналитическое решение (12); круги — численное решение уравнения динамики ГЦК (3).

Рис.2: Вклад трех веток  $B_1$  (сплошная линия),  $B_2$  (пунктирная линия) и  $B_3$  (штрихпунктирная линия) дисперсионного соотношения в зависимость кинетической температуры от времени. Каждой ветке  $B_j$  соответствует характерная частота.

Рис.3: Перераспределение кинетической температуры в ГЦК решетке по направлениям  $x$  (сплошная линия — аналитическое решение (9), круги — численное),  $y$  (пунктирная линия — аналитическое решение (9), круги — численное),  $z$  (линия и круги совпадают со значениями для  $y$ ). Начальные температуры —  $T_{11} \neq 0$ ,  $T_{22} = 0$ ,  $T_{33} = 0$ . Пунктирные линии соответствуют равновесным значениям кинетической температуры.