

Опубликовано в:

Вопросы математической физики и прикладной математики.

Материалы семинара, приуроченного к 75-летию проф. Э.А. Троппа.

СПб.: Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе, 2016.

Динамика тепловых процессов в одномерных гармонических кристаллах

А. М. Кривцов

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого
Институт проблем машиноведения РАН

1. Введение

Методы математической физики весьма эффективны при описании термомеханических процессов в дискретных средах, как на микроскопическом [1], так и на макроскопическом [2] уровне. В ряде случаев они позволяют получить точные решения динамических задач для дискретных структур, и особенно это относится к гармоническим кристаллам. Протекание тепловых процессов в гармонических кристаллах существенно отличается от той картины, которую дает классическая термодинамика [3–5]. Во-первых, в силу линейности системы, высокочастотные тепловые и низкочастотные механические движения оказываются независимыми, что позволяет изучать тепловые процессы отдельно, без возмущений, связанных с механическим движением. Во-вторых, распространение тепла носит баллистический, недиффузионный характер — фактически реализуется тепловая сверхпроводимость. Возникающие тепловые волны нестационарны и характеризуются достаточно сложной динамикой [6, 7].

Несомненным преимуществом линейной системы является возможность ее аналитического описания. Кроме того, последние исследования распространения тепла в низкоразмерных наноструктурах демонстрируют аномальное распространение тепла [8–10], которое в первом приближении может описываться на основе модели гармонического кристалла. Описание тепловых процессов в кристаллических структурах при малой нелинейности также может существенно опираться на результаты, полученные для гармонических систем.

Распространение тепла в одномерных гармонических кристаллах рассматривалось давно, как аналитически, так и численно. Так, в работах [11–13] решалась задача передачи тепла от горячей части кристалла к холодной, в работах [14, 15] — задача о колебаниях синусоидального теплового возмущения в кристалле. Ряд работ использовал тот факт, что уравнения динамики частиц кристалла допускают аналитическое решение [15–17]. Статистическая обработка этого решения, вообще говоря, позволяет получить любую информацию о тепловых процессах в кристалле. Однако, этот путь приводит к весьма громоздким выражениям, которые не всегда удается привести к обозримым формулам. Кроме того, этот путь не распространяем на нелинейные системы, для которых аналитическое решение недоступно. В других работах статистические характеристики получались на основе дифференциальных уравнений динамики кри-

стала [3, 4], однако в большинстве работ рассматривалось стационарное состояние, в котором указанные характеристики не зависят от времени. Несколько более детальный литературный обзор дан в работе [7], за подробной информацией можно обратиться к обзорным статьям [18–20].

Подход, излагаемый в данной статье, основан на работах [6, 7, 21, 22], он позволяет получить динамические уравнения для статистических характеристик кристалла, решение которых дает достаточно простое аналитическое описание тепловых процессов в кристалле. Кристалл рассматривается как стохастическая система, случайность в которую вводится через начальные условия. Подход основан на использовании ковариаций скоростей и перемещений частиц, континуализации по пространственной координате и разделении на быстрые и медленные движения. Быстрые движения описывают уравнивание потенциальной и кинетической составляющих энергии [22], медленные движения — процессы распространения тепла [6, 7]. Применение методов математической физики, в частности, интегрального преобразования Фурье, позволяет получить достаточно простое аналитическое решение для уравнений, описывающих тепловые процессы. В работе рассматриваются одномерные кристаллы, однако данные подходы могут быть распространены на двух- и трехмерные системы.

2. Уравнения движения кристалла

Запишем уравнения движения частиц бесконечного одномерного кристалла в виде

$$\ddot{u}_i = \mathcal{L}u_i, \quad (1)$$

где u_i — перемещение i -ой частицы, индекс i принимает произвольные целые значения, \mathcal{L} — некоторый линейный разностный оператор. Очевидно, такому же уравнению удовлетворяет и $v_i = \dot{u}_i$ — скорость частицы: $\ddot{v}_i = \mathcal{L}v_i$.

В качестве конкретного примера будем рассматривать оператор \mathcal{L} , соответствующий гармонической цепочке на упругом основании:

$$\mathcal{L} = \omega_0^2 \Delta^2 - \omega_1^2, \quad \omega_0 \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{C/m}, \quad \omega_1 \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{C_1/m}, \quad (2)$$

где m — масса частицы, C — жесткость связи между частицами, C_1 — жесткость упругого основания, Δ^2 — разностный оператор 2-го порядка:

$$\Delta^2 u_i \stackrel{\text{def}}{=} u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}. \quad (3)$$

Данная модель широко используется для исследования термомеханических процессов в дискретных системах [18–20]. Кроме того, она позволяет описывать тепловые процессы в низкоразмерных наноструктурах: свободных (при $C_1 = 0$) или находящихся на подложке ($C_1 \neq 0$).

3. Случайные и детерминированные величины

Рассмотрим бесконечное множество различных реализаций одного и того же кристалла, для каждой из которых начальные условия принимают случайные значения:

$$t = 0 : \quad u_i = u_i^0, \quad v_i = v_i^0, \quad (4)$$

где u_i^0, v_i^0 — центрированные случайные величины:

$$\langle u_i^0 \rangle = 0, \quad \langle v_i^0 \rangle = 0. \quad (5)$$

Здесь и далее треугольными скобками обозначается математическое ожидание. Перемещения и скорости, полученные на основе начальных условий (4) в результате решения уравнения движения (1), очевидно, также являются центрированными случайными величинами.

В качестве конкретного примера будем рассматривать начальные условия, соответствующие мгновенному тепловому возмущению:

$$u_i^0 = 0, \quad v_i^0 = \sigma_i \rho_i, \quad (6)$$

где ρ_i — независимые случайные величины с нулевым матожиданием и единичной дисперсией, σ_i — детерминированная девиация начальных скоростей. Интересным с практической точки зрения является случай, когда σ_i является медленно изменяющейся функцией индекса i . Начальные условия (6) могут быть реализованы, например, в результате воздействия на кристалл ультракороткого лазерного импульса [23].

Для описания случайных процессов в подобных системах рассматриваются статистические характеристики случайных величин, являющиеся детерминированными функциями времени. Такой величиной является кинетическая температура частицы i , которая может быть определена через матожидание квадрата скорости:

$$k_B T_i \stackrel{\text{def}}{=} m \langle v_i^2 \rangle, \quad (7)$$

где k_B — постоянная Больцмана, m — масса частицы. Однако, для получения замкнутой системы уравнений, дополнительно к кинетической температуре, требуется рассмотрение ковариации¹ скоростей: $\langle v_p v_q \rangle$ — величины, характеризующей движение пары частиц. На ее основе может быть введена нелокальная (ковариационная) температура [7], обобщающая понятие кинетической температуры.

4. Уравнения динамики ковариаций

Для вывода детерминированных уравнений динамики системы введем ковариации перемещений и скоростей:

$$\xi_{pq} \stackrel{\text{def}}{=} \langle u_p u_q \rangle, \quad \eta_{pq} \stackrel{\text{def}}{=} \langle v_p v_q \rangle, \quad \nu_{pq} \stackrel{\text{def}}{=} \langle u_p v_q \rangle. \quad (8)$$

Ковариация η_{pq} при равенстве индексов дает $\langle v_p^2 \rangle$ — величину, пропорциональную кинетической температуре (7).

Дифференцирование по времени соотношений (8) с учетом уравнений движения (1), дает замкнутую систему уравнений для ковариаций

$$\dot{\xi}_{pq} = \nu_{pq} + \nu_{qp}, \quad \dot{\eta}_{pq} = \mathcal{L}_p \nu_{pq} + \mathcal{L}_q \nu_{qp}, \quad \dot{\nu}_{pq} = \eta_{pq} + \mathcal{L}_q \xi_{pq}, \quad (9)$$

¹ Для центрированных случайных величин ковариация представляет собой матожидание их произведения.

где индекс при операторе \mathcal{L} указывает тот индекс ковариации, на который действует оператор. Отметим, что, в отличие от ξ_{pq} и η_{pq} , ковариация ν_{pq} может меняться при перестановке индексов, поэтому система (9) дополняется аналогичным уравнением для $\dot{\nu}_{qp}$. Повторное дифференцирование позволяет исключить величину ν_{pq} , что приводит к системе

$$\ddot{\xi}_{pq} = (\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q) \xi_{pq} + 2\eta_{pq}, \quad \ddot{\eta}_{pq} = (\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q) \eta_{pq} + 2\mathcal{L}_p \mathcal{L}_q \xi_{pq}. \quad (10)$$

Исключение η_{pq} приводит к уравнению 4-го порядка для ξ_{pq}

$$\ddot{\xi}_{pq} - 2(\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q) \ddot{\xi}_{pq} + (\mathcal{L}_p - \mathcal{L}_q)^2 \xi_{pq} = 0. \quad (11)$$

Данное уравнение можно также записать в операторном виде

$$\left(\mathcal{L}_t^2 - 2\mathcal{L}_t (\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q) + (\mathcal{L}_p - \mathcal{L}_q)^2 \right) \xi_{pq} = 0, \quad (12)$$

где $\mathcal{L}_t \xi \stackrel{\text{def}}{=} \ddot{\xi}$. Впервые это уравнение, по-видимому, было получено в работе [21] (для частного случая свободной гармонической цепочки). После решения уравнения (12) остальные ковариации находятся из соотношений, следующих из (9)–(10):

$$\eta_{pq} = \frac{1}{2} (\mathcal{L}_t - \mathcal{L}_p - \mathcal{L}_q) \xi_{pq}, \quad \dot{\nu}_{pq} = \frac{1}{2} (\mathcal{L}_t - \mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q) \xi_{pq}. \quad (13)$$

С другой стороны, соотношения (13) означают, что величины η_{pq} и $\dot{\nu}_{pq}$ также удовлетворяют уравнению (12).

Таким образом, для ковариаций мы получили различные варианты замкнутых систем линейных уравнений первого (9), второго (10) или четвертого порядка (11). Более подробно дифференцирование ковариаций рассмотрено в приложении 12.

5. Начальные условия

Из начальных условий (4) получаем для ковариаций

$$\xi_{pq}^0 \stackrel{\text{def}}{=} \langle u_p^0 u_q^0 \rangle, \quad \eta_{pq}^0 \stackrel{\text{def}}{=} \langle v_p^0 v_q^0 \rangle, \quad \nu_{pq}^0 \stackrel{\text{def}}{=} \langle u_p^0 v_q^0 \rangle. \quad (14)$$

Данные начальные условия совместно с системой дифференциально-разностных уравнений (9) дают детерминированную начальную задачу для ковариаций. С помощью уравнений (9)–(10) несложно получают начальные условия и для систем 2-го и 4-го порядка. Для последней, в частности, имеем:

$$\begin{aligned} \xi_{pq}^0 &= \nu_{pq}^0 + \nu_{qp}^0, & \ddot{\xi}_{pq}^0 &= (\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q) \xi_{pq}^0 + 2\eta_{pq}^0, \\ \ddot{\xi}_{pq}^0 &= (3\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q) \nu_{pq}^0 + (\mathcal{L}_p + 3\mathcal{L}_q) \nu_{qp}^0. \end{aligned} \quad (15)$$

Таким образом, стохастическая начальная задача для перемещений частиц дает детерминированную начальную задачу для ковариаций. После ее решения кинетическая температура (7) частицы i может быть найдена как

$$k_B T_i = m \eta_{pq} |_{p=q=i}. \quad (16)$$

Отметим, что таким образом температура может быть определена для любой частицы кристалла в любой момент времени для любых равновесных и неравновесных, стационарных и нестационарных процессов.

6. Нелокальные энергии

Введем величину

$$\gamma_{pq} \stackrel{\text{def}}{=} \eta_{pq} - \frac{1}{2} (\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q) \xi_{pq}. \quad (17)$$

Из уравнений (9) следует, что для введенной величины выполняется следующее уравнение баланса:

$$\dot{\gamma}_{pq} = \frac{1}{2} (\mathcal{L}_p - \mathcal{L}_q) (\nu_{pq} - \nu_{qp}). \quad (18)$$

Рассмотрим оператор $\mathcal{L}_p - \mathcal{L}_q$. Индексы p и q будем называть позиционными — они определяют позиции (положения) двух частиц цепочки, для которых вычисляются ковариации. Наряду с ними введем пространственный и корреляционный индексы k и n :

$$k \stackrel{\text{def}}{=} p + q, \quad n \stackrel{\text{def}}{=} q - p. \quad (19)$$

В приложении 13 показано, что для гармонического кристалла на упругой подложке (2) выполняется

$$\mathcal{L}_q - \mathcal{L}_p = \omega_0^2 \mathcal{D}_n \mathcal{D}_k, \quad \mathcal{D}u_i \stackrel{\text{def}}{=} u_{i+1} - u_{i-1}. \quad (20)$$

Перепишем это соотношение в виде

$$\mathcal{L}_q - \mathcal{L}_p = \mathcal{R}_n \mathcal{D}_k, \quad (21)$$

где $\mathcal{R}_n = \omega_0^2 \mathcal{D}_n$. Возможно, для более широкого класса линейных задач соотношение (21) сохранится, а изменится конкретное представление линейного оператора \mathcal{R}_n .

Тогда из уравнения (18) следует, что производная по времени от γ_{pq} пропорциональна конечной разности по пространственному индексу. Следовательно, в случае однородного по пространству состояния кристалла правая часть (18) равна нулю и величина γ_{pq} сохраняется. Это позволяет интерпретировать ее как некоторую энергию. Будем называть ее нелокальной (ковариационной) энергией пары частиц (отнесенной к массе частицы). При $p = q$ нелокальная энергия дает удвоенную удельную энергию частицы. Для нелокальной энергии, согласно (18) и (21), выполняется уравнение баланса

$$\dot{\gamma}_{pq} = -\mathcal{D}_k \chi_{pq}, \quad \chi_{pq} \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{R}_n (\nu_{pq} - \nu_{qp}) / 2, \quad (22)$$

где величина χ_{pq} играет роль потока нелокальной энергии.

Если η_{pq} интерпретировать как нелокальную кинетическую энергию, то тогда из (17) получим нелокальную потенциальную энергию

$$\pi_{pq} \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{1}{2} (\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q) \xi_{pq}. \quad (23)$$

Сумма и разность этих энергий дают нелокальный гамильтониан и лагранжиан пары частиц

$$\gamma_{pq} \stackrel{\text{def}}{=} \eta_{pq} + \pi_{pq}, \quad \zeta_{pq} \stackrel{\text{def}}{=} \eta_{pq} - \pi_{pq}. \quad (24)$$

Первые производные по времени от нелокальных энергий выражаются через смешанные ковариации ν_{pq} и ν_{qp} , вторые производные — через ковариации перемещений и скоростей ξ_{pq} и η_{pq} (см. приложение 12). Однако, вторые производные нелокальных энергий не выражаются через нелокальные энергии.

7. Континуализация

Наряду с безразмерным пространственным индексом k (19) удобно рассматривать размерную пространственную координату

$$x \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} ak = a \frac{p+q}{2}, \quad (25)$$

где a — шаг кристаллической решетки. Индекс k используется при микроскопическом дискретном описании, координата x — при макроскопическом континуальном описании.

В первом континуальном приближении справедливо представление

$$\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q = 2\mathcal{L}, \quad \mathcal{L}_q - \mathcal{L}_p = a\mathcal{R}\partial_x, \quad (26)$$

где \mathcal{L} и \mathcal{R} — линейные разностные операторы, ∂_x — производная по пространственной координате x . Операторы \mathcal{L} и \mathcal{R} действуют на корреляционный индекс n , причем оператор \mathcal{L} совпадает с разностным оператором, действующем в исходном уравнении движения (1), оператор \mathcal{R} определен ранее соотношением (21). Для цепочки на упругом основании (2) выполняется

$$\mathcal{L} = \omega_0^2 \Delta^2 - \omega_1^2, \quad \mathcal{R} = \omega_0^2 \mathcal{D} \quad (27)$$

или в явном виде

$$\mathcal{L}\xi_n = \omega_0^2 (\xi_{n+1} - 2\xi_n + \xi_{n-1}) - \omega_1^2 \xi_n, \quad \mathcal{R}\xi_n = \omega_0^2 (\xi_{n+1} - \xi_{n-1}). \quad (28)$$

Формулы (27) могут быть легко получены из (2) и (20). Альтернативный вывод формул (28) дан в приложении 13.

Введем две частоты: высокую ω и низкую Ω . Частота ω описывает быстрые индивидуальные движения атомов, частота Ω характеризует медленные коллективные движения макроскопической группы атомов. Согласно уравнению движения (1)

$$\ddot{u} = \mathcal{L}u \quad \Rightarrow \quad \mathcal{L} \sim \omega^2 \quad (29)$$

— оператор \mathcal{L} характеризует быстрые индивидуальные движения атомов. Для цепочки на подложке $\omega \sim \omega_0 \sim \omega_1$, $\mathcal{R} \sim \omega^2$. Для частоты длинноволновых колебаний цепочки Ω выполняется оценка

$$\Omega \sim \omega a \partial_x \sim c \partial_x, \quad (30)$$

где $c \stackrel{\text{def}}{=} \omega_0 a$ — скорость звука в кристалле. Здесь в качестве малого параметра выступает $a \partial_x$ — безразмерный дифференциальный оператор по пространственной координате. Тогда из (26)–(27) имеем

$$\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q \sim \omega^2, \quad \mathcal{L}_q - \mathcal{L}_p \sim \omega \Omega. \quad (31)$$

Данные оценки потребуются далее для разделения уравнений движения на быстрые и медленные.

8. Быстрые и медленные движения

Рассмотрим уравнение динамики ковариаций (12)

$$\mathfrak{L} \xi_{pq} = 0, \quad \mathfrak{L} \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{L}_t^2 - 2\mathcal{L}_t (\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q) + (\mathcal{L}_p - \mathcal{L}_q)^2. \quad (32)$$

Возможны два варианта асимптотической оценки для оператора \mathcal{L}_t : в случае быстрых движений $\mathcal{L}_t \sim \omega^2$, для медленных движений $\mathcal{L}_t \sim \Omega^2$. Тогда для быстрых движений первые два слагаемых в операторе \mathfrak{L} имеют порядок ω^4 , третье — порядок $\omega^2 \Omega^2$ и может быть отброшено. Для медленных движений, напротив, может быть отброшено первое слагаемое, имеющее порядок Ω^2 , что мало по сравнению со вторым и третьим слагаемыми, имеющими порядок $\omega^2 \Omega^2$. В результате получаем следующие аппроксимации для оператора \mathfrak{L} в случае быстрых и медленных движений.

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_t \sim \omega^2: \quad \mathfrak{L} &\approx \mathcal{L}_t \left(\mathcal{L}_t - 2(\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q) \right), \\ \mathcal{L}_t \sim \Omega^2: \quad \mathfrak{L} &\approx -2\mathcal{L}_t (\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q) + (\mathcal{L}_p - \mathcal{L}_q)^2. \end{aligned} \quad (33)$$

Для быстрых движений это приводит к уравнению

$$\ddot{\xi}_{pq} - 2(\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q) \xi_{pq} = A_{pq} + B_{pqt}, \quad (34)$$

где A_{pq} и B_{pqt} — константы, полученные в результате двукратного интегрирования по времени (определяются из начальных условий). Уравнение для медленных движений имеет вид

$$2(\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q) \ddot{\xi}_{pq} = (\mathcal{L}_p - \mathcal{L}_q)^2 \xi_{pq}. \quad (35)$$

Таким образом, в обоих случаях мы приходим к уравнению второго порядка по времени. Отметим, что приближенные уравнения (34)–(35) справедливы для ковариаций ξ_{pq} , η_{pq} , $\dot{\nu}_{pq}$, а также для любой их комбинации.

Запишем оператор \mathfrak{L} и его аппроксимации (34)–(35) в первом континуальном приближении (26):

$$\mathfrak{L} = \partial_t^4 - 4\mathcal{L}\partial_t^2 + a^2\mathcal{R}^2\partial_x^2, \quad (36)$$

$$\begin{aligned} \partial_t \sim \omega: \quad \mathfrak{L} &\approx \partial_t^2 (\partial_t^2 - 4\mathcal{L}), \\ \partial_t \sim \Omega: \quad \mathfrak{L} &\approx -4\mathcal{L}\partial_t^2 + a^2\mathcal{R}^2\partial_x^2. \end{aligned} \quad (37)$$

Из (37) видно, что в случае быстрых движений оператор не содержит дифференцирования по пространственной координате, следовательно, пространственный перенос тепла отсутствует. Для медленных движений, напротив, вторая производная по времени противопоставляется второй производной по координате, что свидетельствует о волновом характере переноса тепла в системе. Однако, волновая картина искажается наличием разностных операторов по корреляционному индексу, в результате чего процесс распространения тепла приобретает дополнительную специфику.

9. Динамика быстрых процессов

Как показано выше (34), в приближении быстрых процессов не происходит распространения тепла и динамика процесса в каждой точке кристалла определяется локальным состоянием в этой точке. Поэтому, при исследовании данного случая удобно ограничиться рассмотрением *пространственно-однородного* состояния кристалла. Полученные в результате уравнения можно использовать и для кристалла, тепловое состояние которого медленно изменяется в пространстве. Характеристики указанного состояния просто войдут как параметры в уравнения, полученные для однородного состояния.

Согласно (10), для нелокального лагранжиана справедливо тождество $\zeta_{pq} = \frac{1}{2} \ddot{\xi}_{pq}$. Тогда из (11) следует

$$\ddot{\zeta}_{pq} - 2(\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q)\zeta_{pq} = -\frac{1}{2}(\mathcal{L}_p - \mathcal{L}_q)^2 \xi_{pq}. \quad (38)$$

В пространственно-однородном состоянии все ковариации не зависят от пространственного индекса $k = p + q$. В этом случае оператор $\mathcal{L}_p - \mathcal{L}_q$, содержащий, согласно (21), конечную разность по k , обращает ковариации в ноль. Тогда из уравнений (18) и (38) получаем уравнения пространственно-однородного состояния

$$\dot{\gamma}_{pq} = 0, \quad \ddot{\zeta}_{pq} - 2(\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q)\zeta_{pq} = 0. \quad (39)$$

Отметим, что полученное уравнение для ζ_{pq} совпадает с уравнением быстрых движений (34), однако из (39) следует, что константы интегрирования A_{pq} и B_{pq} для нелокального лагранжиана ζ_{pq} равны нулю. Другие ковариации, такие как ξ_{pq} , η_{pq} и π_{pq} , также удовлетворяют уравнению (34), однако для них константы A_{pq} и B_{pq} в ноль, вообще говоря, не обращаются. Поэтому, при рассмотрении быстрых движений в качестве основных ковариаций удобнее брать γ_{pq} и ζ_{pq} , а все остальные выражать через них.

Переход в уравнениях (39) к корреляционному индексу $n = q - p$ дает

$$\dot{\gamma}_n = 0, \quad \ddot{\zeta}_n = 4\mathcal{L}\zeta_n. \quad (40)$$

Отметим, что полученное уравнение для ζ_n с точностью до множителя совпадает с уравнением динамики цепочки (1). Начальные условия для уравнений (40) имеют вид:

$$\gamma_n^0 = \eta_n^0 - \mathcal{L}\zeta_n^0, \quad \zeta_n^0 = \eta_n^0 + \mathcal{L}\zeta_n^0, \quad \dot{\zeta}_n^0 = 4\mathcal{L}\nu_n^0. \quad (41)$$

После решения начальной задачи (40)–(41) нелокальные кинетическая и потенциальная энергии находятся по формулам

$$\eta_n = \frac{1}{2}(\gamma_n^0 + \zeta_n), \quad \pi_n = \frac{1}{2}(\gamma_n^0 - \zeta_n). \quad (42)$$

Для нахождения ξ_n требуется дополнительное решение разностного уравнения

$$\mathcal{L}\xi_n = -\pi_n. \quad (43)$$

Если начальные условия соответствуют мгновенному тепловому возмущению (6), то начальные условия (41) имеют вид

$$\gamma_n^0 = \sigma^2 \delta_n, \quad \zeta_n^0 = \sigma^2 \delta_n, \quad \dot{\zeta}_n^0 = 0. \quad (44)$$

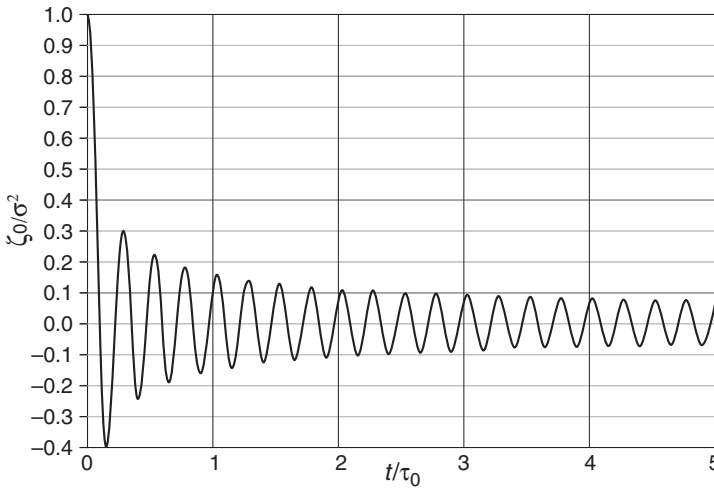


Рис. 1. Переходный процесс, приводящий к уравниванию кинетической и потенциальной энергий кристалла; $\tau_0 = 2\pi/\omega_0$.

Соответствующая начальная задача (40), (44) для ζ_n эквивалентна начальной задаче для кристалла, описываемого уравнением (1), где начальные условия представляют собой сдвиг частицы u_0 на σ^2 . Очевидно, что с течением времени такой кристалл приходит в положение равновесия, а, следовательно, $\zeta_n \rightarrow 0$. Это означает, что со временем нелокальный лагранжиан обращается в ноль, а нелокальные кинетическая и потенциальная энергия уравниваются, что согласуется с теоремой о вириале. При этом, так как в начальный момент времени вся энергия была заключена в кинетической составляющей, то при достижении равновесного состояния кинетическая энергия падает ровно в два раза по сравнению со своим начальным значением.

При отсутствии подложки начальная задача (40)–(41) имеет простое решение [22]:

$$\zeta_n = \sigma^2 J_{2n}(4\omega_0 t) \approx (-1)^n \frac{\sigma^2 \cos\left(4\omega_0 t - \frac{\pi}{4}\right)}{\sqrt{2\pi\omega_0 t}}, \quad (45)$$

где J — функция Бесселя 1-го рода. Приближенная формула — асимптотическая при больших t , однако она дает очень хорошую точность уже при $t \geq \tau_0$, где $\tau_0 = 2\pi/\omega_0$. График функции $\zeta_0(t)$ приведен на рис. 1.

Напомним, что в пространственно-однородном состоянии кристалла функция $\zeta_0(t)$ пропорциональна разности кинетической и потенциальной энергий кристалла, поэтому график на рис. 1 демонстрирует переходный процесс, приводящий к уравниванию этих двух энергий. При наличии подложки решение начальной задачи (40)–(41) может быть построено в интегральной форме с использованием функций Бесселя [25].

Кинетическая температура формально может быть определена формулой (16) в любой момент времени. Однако, введение температуры более естественно после завершения переходного процесса, когда прекращается периодическая перекатка энергии из кинетической в потенциальную. В результате, используя (16)

и (41)–(42), получаем для установившейся температуры формулу

$$T = \lim_{t \rightarrow \infty} \left. \frac{m\eta_n}{2k_B} \right|_{n=0} = \frac{m\sigma^2}{2k_B}. \quad (46)$$

10. Динамика медленных процессов

Медленные процессы в кристалле описываются уравнением (35). Поскольку ковариация γ_{pq} (нелокальный гамильтониан) не участвует в быстрых процессах, то уравнение медленных процессов логичнее записывать именно для нее:

$$2(\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q) \ddot{\gamma}_{pq} = (\mathcal{L}_p - \mathcal{L}_q)^2 \gamma_{pq}. \quad (47)$$

Если в результате быстрых процессов нелокальный лагранжиан ζ_{pq} обращается в ноль, то тогда нелокальная кинетическая энергия η_{pq} совпадает с γ_{pq} . Тогда процесс можно считать термодинамически равновесным и при $p = q$ данные величины дают кинетическую температуру:

$$k_B T = m \langle v_p^2 \rangle = m \eta_{pq}|_{p=q} = m \gamma_{pq}|_{p=q}. \quad (48)$$

Перейдем в уравнении (47) к корреляционному индексу n (19) и пространственной координате x (25), тогда в первом континуальном приближении (26) уравнение (47) принимает вид

$$4\mathcal{L}\ddot{\gamma}_n = a^2 \mathcal{R}^2 \gamma_n'', \quad (49)$$

где a — шаг решетки кристалла, \mathcal{L} и \mathcal{R} — разностные операторы, штрихом обозначена производная по пространственной координате x . Операторы \mathcal{L} и \mathcal{R} действуют на корреляционный индекс n , причем оператор \mathcal{L} совпадает с разностным оператором, действующим в исходном уравнении движения (1). Для цепочки на упругом основании операторы \mathcal{L} и \mathcal{R} имеют вид (27), что позволяет записать уравнение (49) в форме

$$4(\gamma_{n+1} - \lambda\gamma_n + \gamma_{n-1})'' = c^2(\gamma_{n+2} - 2\gamma_n + \gamma_{n-2})'', \quad (50)$$

где $c \stackrel{\text{def}}{=} a\omega_0$ — скорость звука в кристалле.

Введем нелокальную температуру [7]

$$k_B(-1)^n \theta_n \stackrel{\text{def}}{=} m\eta_n = \langle v_p v_q \rangle|_{p=q}, \quad (51)$$

где k_B — постоянная Больцмана. Так как $\eta_n = \gamma_n$, то уравнение (50) для нелокальной температуры записывается в виде

$$4(\theta_{n+1} + \lambda\theta_n + \theta_{n-1})'' = c^2(\theta_{n+2} - 2\theta_n + \theta_{n-2})''. \quad (52)$$

После решения уравнения (52) кинетическая температура определяется формулой

$$T(t, x) = \theta_n(t, x)|_{n=0}. \quad (53)$$

При отсутствии упругого основания выполняется

$$\mathcal{L}u_n = \omega_0^2 \Delta^2, \quad \mathcal{R}^2 = \mathcal{L}(-1)^n \mathcal{L}(-1)^n \quad (54)$$

что позволяет записать уравнение (49) в виде

$$4\mathcal{L}\dot{\gamma}_n = a^2 \mathcal{L}(-1)^n \mathcal{L}(-1)^n \gamma_n'' . \quad (55)$$

Один из операторов \mathcal{L} устраняется двукратным суммированием по n . Тогда, после перехода к нелокальной температуре, приходим к уравнению

$$\ddot{\theta}_n + \frac{a^2}{4} \mathcal{L}\theta_n'' = 0 . \quad (56)$$

Констант суммирования в правой части уравнения не появляется [6]. Преобразование Фурье по x дает для Фурье-образа $\hat{\theta}_n$ уравнение

$$\ddot{\hat{\theta}}_n = \left(\frac{ax}{2}\right)^2 \mathcal{L}\hat{\theta}_n , \quad (57)$$

где x — волновое число. Полученное уравнение с точностью до постоянного множителя совпадает с исходным уравнением (1) динамики частиц кристалла. Это позволяет построить аналитическое решение уравнений (56)–(57) — см. следующий раздел.

Несмотря на внешние различия между уравнениями (52) и (56), можно показать [25], что эволюция температурного профиля при мгновенном тепловом возмущении в них описывается одним и тем же законом, отличие состоит лишь в более низкой скорости распространения теплового фронта для уравнения (52).

11. Распространение тепла в свободном одномерном кристалле

Рассмотрим частный случай отсутствия упругого основания при начальных условиях, отвечающих мгновенному тепловому возмущению (6). Соответствующая начальная задача для нелокальной температуры θ_n имеет вид

$$\begin{aligned} \ddot{\theta}_n + \frac{1}{4} c^2 (\theta_{n-1} - 2\theta_n + \theta_{n+1})'' &= 0 , \\ \theta_n|_{t=0} &= T_0(x)\delta_n , \quad \dot{\theta}_n|_{t=0} = 0 , \end{aligned} \quad (58)$$

где $c = \omega_0 a$ — скорость звука в кристалле, $T_0(x) = \frac{1}{2k_B} m\sigma^2(x)$ — начальное пространственное распределение температуры; $\delta_n = 1$ для $n = 0$ и $\delta_n = 0$ для $n \neq 0$. Начальные условия (58) взяты после окончания высокочастотного переходного процесса, что позволяет использовать для T_0 формулу (46). Интегральное преобразование Фурье по пространственной координате позволяет решить задачу (58) аналитически [6, 7]. Для Фурье-образа $\hat{\theta}_n(t, x)$ получаем

$$\begin{aligned} \ddot{\hat{\theta}}_n &= \frac{1}{4} c^2 x^2 \left(\hat{\theta}_{n-1} - 2\hat{\theta}_n + \hat{\theta}_{n+1} \right) , \\ \hat{\theta}_n|_{t=0} &= \hat{T}_0(x)\delta_n , \quad \dot{\hat{\theta}}_n|_{t=0} = 0 , \end{aligned} \quad (59)$$

где x — волновое число, $\hat{T}_0(x)$ — Фурье-образ начального распределения температуры $T_0(x)$. Задача (59) эффективно решается с помощью функций Бесселя. В частности, функции Бесселя успешно применяются для описания ударно-волновых процессов в гармонических цепочках [16, 17]. Аналогично, задача (50) имеет аналитическое решение $\hat{\theta}_n(t, x) = \hat{T}_0(x)J_{2n}(cxt)$, где J_{2n} — функции

Бесселя 1-го рода. Наиболее интересен случай $n = 0$, который дает Фурье-образ $\hat{T}(t, \kappa)$ распределения кинетической температуры:

$$\hat{T}(t, \kappa) = \hat{T}_0(\kappa) J_0(c\kappa t). \quad (60)$$

Из формулы (60) следует, что образ $\hat{T}(t, \kappa)$ удовлетворяет дифференциальному уравнению Бесселя

$$\ddot{\hat{T}} + \frac{1}{t} \dot{\hat{T}} = -c^2 \kappa^2 \hat{T}. \quad (61)$$

Применение обратного преобразования Фурье к уравнению (61) приводит к дифференциальному уравнению в частных производных для температурного поля

$$\ddot{T} + \frac{1}{t} \dot{T} = c^2 T''. \quad (62)$$

Данное уравнение отличается от классического уравнения теплопроводности наличием второй производной по времени и переменного множителя при первой производной. Внешне оно ближе к уравнению гиперболической теплопроводности Максвелла–Каттанео–Вернотте [24], однако имеет существенное отличие: вместо времени релаксации (константа) в уравнении (62) стоит физическое время (переменная). С этим связано то, что уравнение (62), в отличие от известных макроскопических уравнений переноса тепла, обратимо по времени (уравнение симметрично относительно замены t на $-t$).

Начальные условия для уравнения (62), согласно (58), имеют вид:

$$T|_{t=0} = T_0(x), \quad \dot{T}|_{t=0} = 0. \quad (63)$$

Отметим, что, благодаря обращению в ноль $\dot{T}|_{t=0}$, в уравнении (62) не возникает особенности при $t = 0$. Указанное условие является следствием начальных условий (6) для уравнений динамики частиц кристалла (1). Данная задача соответствует мгновенному тепловому возмущению, при котором в начальный момент отсутствуют тепловые потоки в кристалле. В принципе, можно рассмотреть начальную задачу с ненулевыми начальными потоками, для которой $\dot{T}|_{t=0} \neq 0$. Этому случаю будет соответствовать уравнение, отличное от (62). Оно может быть получено из решения дифференциально-разностного уравнения (58), аналогично тому, как было получено уравнение (62).

Применение обратного преобразования Фурье к формуле (60) дает аналитическое решение начальной задачи (62)–(63):

$$T(t, x) = \frac{1}{\pi} \int_{-t}^t \frac{T_0(x - c\tau)}{\sqrt{t^2 - \tau^2}} d\tau. \quad (64)$$

Приведем результат расчета по формуле (64) для двух вариантов начального распределения температуры (подробнее об этих решениях см. [7]).

Синусоидальное тепловое возмущение:

$$T_0(x) = A_0 \sin \kappa x + B \quad \Rightarrow \quad T(t, x) = A_0 J_0(\kappa c t) \sin \kappa x + B, \quad (65)$$

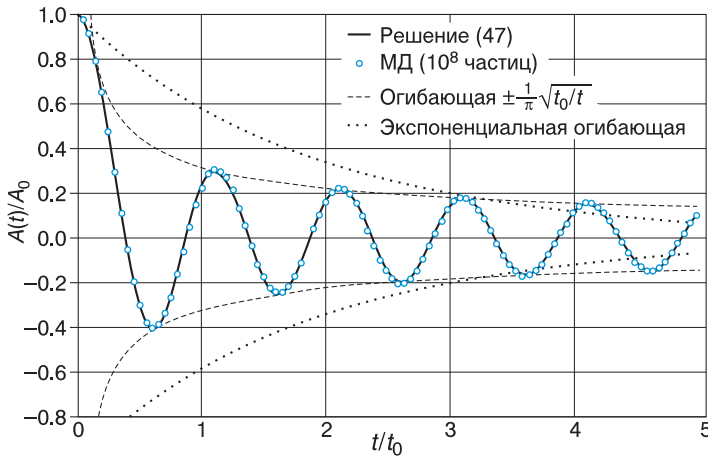


Рис. 2. Колебательное затухание амплитуды теплового возмущения. Сравнение аналитического решения (65) с результатами молекулярно-динамического (МД) моделирования (10^4 цепочек по 10^4 частиц в каждой; $t_0 = \lambda/c$).

где A_0 — амплитуда теплового возмущения, B — тепловой фон, $\kappa = 2\pi/\lambda$ — волновое число, λ — длина волны теплового возмущения. Графики, демонстрирующие практически полное совпадение зависимости (65) амплитуды теплового возмущения $A(t) = A_0 J_0(\kappa ct)$ с результатами молекулярно-динамического моделирования [7], приведены на рис. 2.

Ступенчатое начальное распределение температуры, моделирующее перераспределение тепла между горячим и холодным телом:

$$T_0(x) = (T_2 - T_1)H(-x) + T_1 \quad \Rightarrow \quad T(t, x) = \frac{T_2 - T_1}{\pi} \arccos \frac{x}{ct} + T_1, \quad (66)$$

где $T_2 > T_1$ — температура горячего и холодного тела, соответственно; $H(x)$ — функция Хевисайда (0 для $x < 0$ и 1 для $x > 0$); при $|x| > ct$ сохраняется исходное распределение температуры. На рис. 3 приведено сравнение решения (66) с молекулярно-динамическим моделированием [7] при различном числе частиц. Графики наглядно демонстрируют сходимость численного решения к аналитическому при увеличении числа частиц.

Таким образом, для обеих задач получается простое аналитическое решение. Полученные решения кардинально отличаются от решений на основе классической теории распространения тепла, использующей закон теплопроводности Фурье. В первой задаче классическая теплопроводность дает экспоненциальное неколебательное затухание, во второй задаче — мгновенное распространение бесконечно малого возмущения по всему кристаллу с последующим замедлением передачи тепла. Напротив, решение (65) дает колебательное затухание возмущения, обратно пропорциональное корню из времени; решение (66) — распространение тепла с постоянной скоростью c . Последний результат понятнее с физической точки зрения, кроме того, он лучше согласуется с последними экспериментальными данными по распространению тепла в наноструктурах [8, 10].

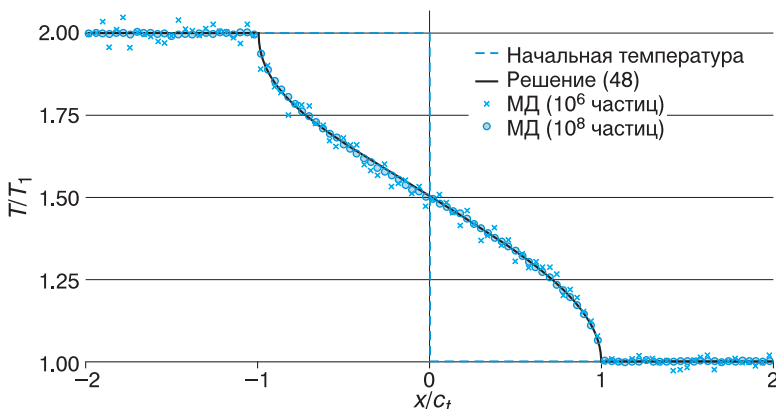


Рис. 3. Распространение тепла из горячей в холодную область кристалла. Аналитическое решение (66) сравнивается с молекулярно-динамическим (МД) моделированием: 10^3 цепочек по 10^3 частиц (крест — осреднение по 10 частицам); 10^4 цепочек по 10^4 частиц (кружок — осреднение по 100 частицам).

12. Заключение

В работе изложен метод, позволяющий аналитически описывать тепловые процессы в одномерных гармонических кристаллах. Рассматриваются дискретные уравнения динамики бесконечного кристалла. Стохастичность задачи заключена в начальных условиях. Подход позволяет свести стохастическую задачу для перемещений частиц к замкнутой детерминированной задаче для статистических характеристик пар частиц. В качестве таких характеристик могут выступать ковариации перемещений или скоростей частиц. Задача сводится к линейным уравнениям, дифференциальным по времени и разностным по двум позиционным индексам пары частиц. Замкнутая система содержит четыре уравнения первого порядка, два уравнения второго порядка или одно уравнение четвертого порядка по времени.

Тепловые процессы разделяются на быстрые и медленные. Быстрые движения характеризуются частотами, соответствующими колебаниям индивидуальных атомов, медленные движения — частотами, соответствующим коллективным колебаниям макроскопических групп атомов. Для быстрых и медленных процессов удается приближенно получить независимые дифференциально-разностные уравнения второго порядка.

Далее, осуществляется переход от позиционных индексов пары частиц к пространственной координате и корреляционному индексу. Пространственная координата характеризует положение центра пары частиц, корреляционный индекс — удаленность частиц, принадлежащих паре, друг от друга. По пространственной координате проводится континуализация. В результате, для быстрых движений получается уравнение, дифференциальное по времени и разностное по корреляционному индексу. Уравнение не содержит дифференцирования по пространственной координате и поэтому описывает изолированные процессы в каждой точке пространства, переноса тепла для быстрых движений не наблюдается. В процессе быстрых движений происходит перераспределение энергии

между кинетической и потенциальной, после затухания переходного процесса энергии уравниваются, что согласуется с теоремой о вириале.

Для медленных движений получено уравнение второго порядка (49), дифференциальное по времени и координате, при этом оно является разностным по корреляционному индексу (можно интерпретировать это уравнение как бесконечную систему волновых дифференциальных уравнений в частных производных). Полученное дифференциально-разностное уравнение полностью описывает перенос тепла в кристалле. Решение уравнения в случае мгновенного теплового возмущения позволяет получить замкнутое дифференциальное уравнение в частных производных для кинетической температуры (62), допускающее простое аналитическое решение. Специфической особенностью уравнения (62) является то, что оно обратимо по времени. Вопрос о противоречии между обратимостью микроскопических и необратимостью макроскопических уравнений является одним из важных вопросов современной физики [5]. Уравнение (62) позволяет по-новому взглянуть на эту проблему: оно демонстрирует, что существуют процессы распространения тепла, описываемые на макроскопическом уровне обратимыми уравнениями (симметричным относительно замены t на $-t$). При этом сам процесс нельзя считать полностью обратимым: с течением времени тепловые возмущения затухают и система приходит в состояние, характеризующееся постоянной температурой (по времени и пространству). Уравнение (62) отличается от известных уравнений классической и гиперболической теплопроводности [24, 26], однако в термодинамическом пределе данное уравнение точно описывает процессы распространения тепла в одномерном кристалле, а полученные на его основе решения могут послужить для описания термомеханических процессов в наноструктурах и сверхчистых материалах [8, 9, 27].

Благодарности

Автор благодарен всем тем, кто принимал участие в обсуждении данных исследований, в особенности М. Б. Бабенкову, О. В. Гендельману, Е. А. Ивановой, Д. А. Индейцеву, М. Л. Качанову, В. А. Кузькину, С. А. Лурье, Н. Ф. Морозову, Э. А. Троппу, В. Г. Хуверу и Д. В. Цветкову.

Приложения

А. Дифференцирование ковариаций

А.1. Определения ковариаций

Основные ковариации — перемещений, скоростей и смешанные:

$$\xi_{pq} \stackrel{\text{def}}{=} \langle u_p u_q \rangle, \quad \eta_{pq} \stackrel{\text{def}}{=} \langle v_p v_q \rangle, \quad \nu_{pq} \stackrel{\text{def}}{=} \langle u_p v_q \rangle. \quad (67)$$

Нелокальная потенциальная энергия:

$$\pi_{pq} \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{1}{2} (\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q) \xi_{pq}. \quad (68)$$

Нелокальные гамильтониан и лагранжиан:

$$\gamma_{pq} \stackrel{\text{def}}{=} \eta_{pq} + \pi_{pq}, \quad \zeta_{pq} \stackrel{\text{def}}{=} \eta_{pq} - \pi_{pq}. \quad (69)$$

Все ковариации, кроме ν_{qp} , симметричны относительно перестановки индексов.

А.2. Первые производные по времени

Ковариация перемещений, нелокальная потенциальная, кинетическая и полная энергии:

$$\begin{aligned}\dot{\xi}_{pq} &= \nu_{pq} + \nu_{qp}, & \dot{\pi}_{pq} &= -\frac{1}{2} (\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q) (\nu_{pq} + \nu_{qp}), \\ \dot{\eta}_{pq} &= \mathcal{L}_p \nu_{pq} + \mathcal{L}_q \nu_{qp}, & \dot{\gamma}_{pq} &= \frac{1}{2} (\mathcal{L}_p - \mathcal{L}_q) (\nu_{pq} - \nu_{qp}).\end{aligned}\quad (70)$$

Нелокальный лагранжиан:

$$\dot{\zeta}_{pq} = \frac{1}{2} (3\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q) \nu_{pq} + \frac{1}{2} (\mathcal{L}_p + 3\mathcal{L}_q) \nu_{qp}. \quad (71)$$

Альтернативная формула для нелокального лагранжиана:

$$\dot{\zeta}_{pq} = \frac{1}{2} (\mathcal{L}_p - \mathcal{L}_q) (\nu_{pq} - \nu_{qp}) + (\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q) (\nu_{pq} + \nu_{qp}). \quad (72)$$

Смешанные ковариации:

$$\dot{\nu}_{pq} = \eta_{pq} + \mathcal{L}_q \xi_{pq}, \quad \dot{\nu}_{qp} = \eta_{qp} + \mathcal{L}_p \xi_{qp}. \quad (73)$$

Симметричная и антисимметричная форма смешанных ковариаций:

$$\dot{\nu}_{pq} + \dot{\nu}_{qp} = 2\zeta_{pq}, \quad \dot{\nu}_{pq} - \dot{\nu}_{qp} = (\mathcal{L}_q - \mathcal{L}_p) \xi_{qp}. \quad (74)$$

А.3. Вторые производные по времени

Ковариация перемещений и скоростей:

$$\ddot{\xi}_{pq} = 2\zeta_{pq}, \quad \ddot{\eta}_{pq} = (\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q) \eta_{pq} + 2\mathcal{L}_p \mathcal{L}_q \xi_{pq}. \quad (75)$$

Нелокальная потенциальная и полная энергии:

$$\ddot{\pi}_{pq} = -(\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q) \zeta_{pq}, \quad \ddot{\gamma}_{pq} = -\frac{1}{2} (\mathcal{L}_p - \mathcal{L}_q)^2 \xi_{pq}. \quad (76)$$

Нелокальный лагранжиан:

$$\ddot{\zeta}_{pq} = 2(\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q) \zeta_{pq} - \frac{1}{2} (\mathcal{L}_p - \mathcal{L}_q)^2 \xi_{pq}. \quad (77)$$

Альтернативная формула для ковариации скоростей:

$$\ddot{\eta}_{pq} = (\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q) \zeta_{pq} - \frac{1}{2} (\mathcal{L}_p - \mathcal{L}_q)^2 \xi_{pq}. \quad (78)$$

А.4. Третьи производные по времени

Ковариации перемещений и скоростей:

$$\ddot{\xi}_{pq} = (3\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q) \nu_{pq} + (\mathcal{L}_p + 3\mathcal{L}_q) \nu_{qp}, \quad (79)$$

$$\ddot{\eta}_{pq} = \mathcal{L}_p (\mathcal{L}_p + 3\mathcal{L}_q) \nu_{pq} + \mathcal{L}_q (3\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q) \nu_{qp}. \quad (80)$$

А.5. Представление через ковариации перемещений

$$\begin{aligned} \eta_{pq} &= \frac{1}{2} \ddot{\xi}_{pq} - \frac{1}{2} (\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q) \xi_{pq}, & \pi_{pq} &= -\frac{1}{2} (\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q) \xi_{pq}, \\ \gamma_{pq} &= \frac{1}{2} \ddot{\xi}_{pq} - (\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q) \xi_{pq}, & \zeta_{pq} &= \frac{1}{2} \ddot{\xi}_{pq}, \\ \dot{\nu}_{pq} &= \frac{1}{2} \ddot{\xi}_{pq} + \frac{1}{2} (\mathcal{L}_q - \mathcal{L}_p) \xi_{pq}. \end{aligned} \quad (81)$$

13. В. Факторизация разности $\mathcal{L}_q - \mathcal{L}_p$

Для гармонического кристалла на упругой подложке (2) выполняется

$$\mathcal{L}_q - \mathcal{L}_p = \omega_0^2 \mathcal{D}_n \mathcal{D}_k, \quad (82)$$

где

$$k \stackrel{\text{def}}{=} p + q, \quad n \stackrel{\text{def}}{=} q - p, \quad \mathcal{D}u_i \stackrel{\text{def}}{=} u_{i+1} - u_{i-1}. \quad (83)$$

Доказательство. Из (2) следует

$$\mathcal{L}_q - \mathcal{L}_p = \omega_0^2 (\Delta_q^2 - \Delta_p^2). \quad (84)$$

Непосредственное вычисление дает

$$r (\Delta_q^2 - \Delta_p^2) \xi_{n,k} = \xi_{n+1,k+1} - \xi_{n-1,k+1} + \xi_{n-1,k-1} - \xi_{n+1,k-1} = \mathcal{D}_n \mathcal{D}_k \xi_{n,k}, \quad (85)$$

что и требовалось доказать.

С. Континуализация

Ковариации могут быть записаны в виде

$$\xi_{pq} = \xi_n(x), \quad (86)$$

где

$$n \stackrel{\text{def}}{=} q - p, \quad x \stackrel{\text{def}}{=} a \frac{p + q}{2}. \quad (87)$$

Здесь n — корреляционный индекс, x — пространственная координата. Зависимость от x будем считать достаточно гладкой, чтобы функции допускали разложение в ряд Тейлора. Запишем вторые разности ковариаций

$$\begin{aligned} \Delta_p^2 \xi_{pq} &= \xi_{n-1} \left(x + \frac{a}{2} \right) - 2\xi_n(x) + \xi_{n+1} \left(x - \frac{a}{2} \right), \\ \Delta_q^2 \xi_{pq} &= \xi_{n+1} \left(x + \frac{a}{2} \right) - 2\xi_n(x) + \xi_{n-1} \left(x - \frac{a}{2} \right). \end{aligned} \quad (88)$$

Раскладывая в ряд по x до слагаемых 2-го порядка малости, получаем

$$\begin{aligned} \Delta_p^2 \xi_{pq} &= \Delta^2 \xi_n + \frac{a}{2} (\xi_{n-1} - \xi_{n+1})' + \frac{a^2}{8} (\xi_{n-1} + \xi_{n+1})'', \\ \Delta_q^2 \xi_{pq} &= \Delta^2 \xi_n + \frac{a}{2} (\xi_{n+1} - \xi_{n-1})' + \frac{a^2}{8} (\xi_{n+1} + \xi_{n-1})'', \end{aligned} \quad (89)$$

где $\Delta^2 \xi_n = \xi_{n+1} - 2\xi_n + \xi_{n-1}$, штрихом обозначена производная по x . Складывая и вычитая эти соотношения, получаем

$$\Delta_p^2 + \Delta_q^2 = 2\Delta^2 + \frac{a^2}{4} (\Delta^2 + 2) \partial_x^2, \quad \Delta_p^2 - \Delta_q^2 = -a \mathcal{D} \partial_x, \quad (90)$$

где использовано

$$(\Delta^2 + 2) \xi_n = \xi_{n+1} + \xi_{n-1}, \quad \mathcal{D}\xi_n = \xi_{n+1} - \xi_{n-1}. \quad (91)$$

Первое соотношение является очевидным тождеством, второе — обозначением.

Используя полученные разложения, для цепочки на упругом основании (2) получаем

$$\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q = 2(\omega_0^2 \Delta^2 - \omega_1^2) + \frac{1}{4}c^2(\Delta^2 + 2)\partial_x^2, \quad \mathcal{L}_q - \mathcal{L}_p = \omega_0 c \mathcal{D}\partial_x, \quad (92)$$

где $c \stackrel{\text{def}}{=} \omega_0 a$ — скорость звука. В первом приближении имеем

$$\mathcal{L}_p + \mathcal{L}_q = 2\mathcal{L}, \quad \mathcal{L}_q - \mathcal{L}_p = a\mathcal{R}\partial_x, \quad (93)$$

где для операторов \mathcal{L} и \mathcal{R} справедливы представления

$$\mathcal{L} = \omega_0^2 \Delta^2 - \omega_1^2, \quad \mathcal{R} = \omega_0^2 \mathcal{D} \quad (94)$$

или

$$\mathcal{L}\xi_n = \omega_0^2(\xi_{n+1} - 2\xi_n + \xi_{n-1}) - \omega_1^2, \quad \mathcal{R}\xi_n = \omega_0^2(\xi_{n+1} - \xi_{n-1}). \quad (95)$$

Таким образом, \mathcal{L} — это исходный оператор, входящий в уравнение движения частицы (1), оператор \mathcal{R} определен ранее соотношением (21).

Литература

- [1] Тропн Э. А., Флегонтова Е. Ю. Асимптотика матричных элементов интеграла прямых столкновений уравнения Больцмана. ЖТФ, **85**(6), 23–27 (2015).
- [2] Бахолдин С. И., Галактионов Е. В., Тропн Э. А. Расчет термоупругих напряжений вблизи фронта кристаллизации для монокристаллических стержней круглого сечения, выращиваемых из расплава. ЖТФ, **84**(8), 1–7 (2014).
- [3] Rieder Z., Lebowitz J. L., and Lieb E. Properties of a Harmonic Crystal in a Stationary Nonequilibrium State. J. Math. Phys., **8**(5), 1073–1078 (1967).
- [4] Dhar A. and Dandekar R., Heat transport and current fluctuations in harmonic crystals, Physica A, **418**, 49–64 (2015).
- [5] Hoover W. G. and Hoover C. G., *Simulation and control of chaotic nonequilibrium systems* (Advanced Series in Nonlinear Dynamics: Vol. 27, World Scientific, 324 p. (2015).
- [6] Кривцов А. М. Распространение тепла в бесконечном одномерном гармоническом кристалле. Доклады Академии наук. том 464, № 2, с. 162–166 (2015).
- [7] Krivtsov A. M. On unsteady heat conduction in a harmonic crystal, ArXiv:1509.02506, 2015.
- [8] Chang C. W. et al., Breakdown of fourier’s law in nanotube thermal conductors, Phys. Rev. Lett. **101**, 075903 (2008).
- [9] Xu X. et al., Length-dependent thermal conductivity in suspended single-layer graphene, Nature Communications **5**, 3689 (2014).
- [10] Hsiao T. K. et al., Micron-scale ballistic thermal conduction and suppressed thermal conductivity in heterogeneously interfaced nanowires, Phys. Rev. B **91**, 035406 (2015).
- [11] Hemmer P. C. Dynamic and Stochastic types of motion in linear chain, Thesis. Trondheim, Norway. 95 p. (1959).
- [12] Shoby K., Yoshida T., Mori T., Dynamic properties of one-dimensional harmonic liquids. II, Progress of Theoret. Phys. **66**, 1160–1168 (1981).

- [13] *Rubin R.J. and Greer W.L.*, Abnormal lattice thermal conductivity of a one-dimensional, harmonic, isotopically disordered crystal, *J. of Math. Phys.* **12**, 1686–1701 (1971).
- [14] *Gendelman O. V. and Savin A. V.*, Nonstationary heat conduction in one-dimensional chains with conserved momentum, *Phys. Rev. E* **81**, 020103 (2010).
- [15] *Kachman T.*, Master-degree thesis under supervision of O.V. Gendelman, 187 p., Technion, Izrael (2011).
- [16] *Manvi R., Duwall G.E., and Lowell S.C.*, Finite amplitude longitudinal waves in lattices, *Int. J. Mech. Sci.* **11**, 1 (1969).
- [17] *Holian B. L. and Straub G. K.*, Molecular dynamics of shock waves in one-dimensional chains, *Phys. Rev. B* **18**, 1593 (1978).
- [18] *Bonetto F., Lebowitz J. L., and Rey-Bellet L.*, Fourier's law: a challenge to theorists in *Mathematical Physics 2000*, edited by A. Fokas *et al.*. Imperial College Press, London, 128–150 (2000).
- [19] *Lepri S., Livi R., and Politi A.*, Thermal conduction in classical low-dimensional lattices, *Phys. Rep.* **377**, 1–80 (2003).
- [20] *Dhar A.*, Heat transport in low-dimensional systems, *Advances in Phys.* **57**, 457–537 (2008).
- [21] *Krivtsov A. M.*, Dynamics of energy characteristics in one-dimensional crystal, Proc. of XXXIV Summer School “Advanced Problems in Mechanics”, St Petersburg, Russia, 274–208 (2006).
- [22] *Кривцов А. М.* Колебания энергий в одномерном кристалле. Доклады Академии наук, **458** 3, 279–281 (2014).
- [23] *Poletkin K. V., Gurzadyan G. G., Shang J., and Kulish V.*, Ultrafast heat transfer on nanoscale in thin gold films, *Applied Physics B* **107**, 137–143 (2012).
- [24] *Chandrasekharaiah D. S.*, Hyperbolic thermoelasticity: a review of recent literature, *Appl. Mech. Rev.*, **39**, 355–376, (1986).
- [25] *Бабенков М. Б., Кривцов А. М.* В печати.
- [26] *Tzou D.Y.*, Macro- to microscale heat transfer: the lagging behavior (John Wiley & Sons) 566 p. (2015).
- [27] *Гольдштейн Р. В., Морозов Н. Ф.* Механика деформирования и разрушения наноматериалов и нанотехнологии, *Физ. мезомех*, **10** № 5, 17–30 (2007).