

Министерство образования и науки Российской Федерации  
Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого  
Физико-механический институт  
Высшая школа теоретической механики и математической физики

Работа допущена к защите  
Директор ВШТМиМФ,  
д.ф.-м.н., чл.-корр. РАН  
\_\_\_\_\_ А. М. Кривцов  
« \_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2022 г.

## **ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА БАКАЛАВРА**

### **Исследование распространения энергии среде с микроструктурой**

по направлению подготовки

01.03.03 «Механика и математическое моделирование»

профиль

01.03.03\_03 Механика и математическое моделирование процессов  
нефтегазодобычи

Выполнил

студент гр. 5030103/80301

И. Е. Груздев

Руководитель

д.ф.-м.н., доцент

А. М. Кривцов

Санкт-Петербург

2022

**САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ  
УНИВЕРСИТЕТ ПЕТРА ВЕЛИКОГО**  
**Физико – механический институт**  
**Высшая школа теоретической механики и математической физики**

УТВЕРЖДАЮ

Директор ВШТМиМФ

А. М. Кривцов

«\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

**ЗАДАНИЕ**

**на выполнение выпускной квалификационной работы**

студенту Груздеву Игорю Евгеньевичу, гр. 5030103/80301

1. Тема работы: Исследование распространения энергии в среде с микроструктурой
2. Срок сдачи студентом законченной работы: 06.06.2022
3. Исходные данные по работе: актуальные научные публикации, исследования энергетической динамики в средах с микроструктурой.
4. Содержание работы (перечень подлежащих разработке вопросов): Постановка задачи квалификационной работы, исследование распространения энергии в различных средах с микроструктурой и сравнение с самой простой моделью – цепочкой Гука.
5. Перечень графического материала (с указанием обязательных чертежей): не предусмотрено
6. Консультанты по работе: отсутствуют
7. Дата выдачи задания 13.05.2022

Руководитель ВКР \_\_\_\_\_ А. М. Кривцов

Задание принял к исполнению 13.05.2022

Студент \_\_\_\_\_ И. Е. Груздев

## РЕФЕРАТ

На 43 с., 5 рисунков

ДИНАМИКА, ЦЕПОЧКА, ЭНЕРГИЯ, ПОТОК, ДИСПЕРСИЯ

В данной работе проводится сравнительный анализ движения энергетического центра в гармонических одноатомном и двухатомном кристаллах, а также кристалла на упругом основании. В каждом случае получено уравнение движения энергетического центра для произвольного возмущения, обладающего конечной энергией.

Показано, что в цепочке Гука и кристалла на упругом основании энергетический центр движется равномерно. При этом при задании первого момента энергии для двухатомной цепочки достаточно трудно получить точное сохранение потока энергии. Доказано, что в кристалле с чередованием масс можно получить аналогичный результат при более сложном задании первого момента энергии.

Также для кристалла Гука и цепочки на упругом основании были приведены выкладки, показывающие, что вторая производная второго момента энергии — постоянная величина. На основе этого можно вывести уравнения эволюции энергетического радиуса, который будет аналогом радиуса инерции в динамике массы.

На основе проведённого исследования строится аналогия между динамикой массы и динамикой энергии.

## ABSTRACT

43 pages, 5 figures

DYNAMIC, CHAIN, ENERGY, FLUX, DISPERSION.

In this work a comparative analysis of the movement of an energy center in harmonic monatomic and diatomic crystals, as well as a crystal on an elastic foundation, is carried out. In each case, the equation of motion of the energy center for an arbitrary perturbation with a finite energy is obtained.

It is shown that in the chain of Hook's and a crystal on an elastic foundation, the energy center moves uniformly. In this case, when specifying the first moment of energy for a diatomic chain, it is rather difficult to obtain an exact conservation of the energy flux. It is proved that in a crystal with mass alternation, a similar result can be obtained with a more complex setting of the first moment of energy.

Also, for a Hook's crystal and a chain on an elastic foundation, calculations were made showing that the second derivative of the second moment of energy is a constant. Based on this, one can derive the equations of evolution of the energy radius, which will be an analogue of the radius of gyration in mass dynamics.

Based on this research, an analogy is built between the dynamics of mass and the dynamics of energy.

## СОДЕРЖАНИЕ

<b>ВВЕДЕНИЕ.....</b>	<b>6</b>
<b>Глава 1. Распространение энергии в одноатомном кристалле.....</b>	<b>9</b>
1.1. Уравнение динамики одноатомного кристалла.....	9
1.2. Дисперсионные соотношения цепочки Гука.....	9
1.3. Элементарные энергии. Закон сохранения энергии.....	11
1.4. Понятие $k$ -ого момента энергии.....	12
1.5. Первый момент и поток энергии.....	13
1.6. Движение энергетического центра.....	14
1.7. Второй момент и суперпоток энергии.....	15
1.8. Энергетический радиус.....	17
1.9. Заключение к главе 1.....	18
<b>Глава 2. Распространение энергии в кристалле с чередованием масс.....</b>	<b>20</b>
2.1. Уравнение динамики кристалла с чередованием масс.....	20
2.2. Дисперсионные соотношения кристалла с чередованием масс.....	20
2.3. Закон сохранения энергии.....	22
2.4. Первый момент и поток энергии.....	23
2.5. Первый момент энергии с непостоянными коэффициентами.....	28
2.6. Первый момент энергии с полуцелыми индексами.....	30
2.7. Заключение к главе 2.....	32
<b>Глава 3. Распространение энергии в кристалле на подложке.....</b>	<b>34</b>
3.1. Уравнение динамики кристалла на подложке.....	34
3.2. Дисперсионные соотношения кристалла на подложке.....	35
3.3. Элементарные энергии. Закон сохранения энергии.....	35

3.4. Первый момент и поток энергии .....	36
3.5. Второй момент и суперпоток энергии .....	37
3.6. Выводы к главе 3.....	38
<b>ЗАКЛЮЧЕНИЕ .....</b>	<b>39</b>
<b>СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ .....</b>	<b>41</b>

## ВВЕДЕНИЕ

Описание материалов на нанометровом уровне имеет существенные особенности [15, 16], которые связаны с тем, что атомы в веществе располагаются дискретно. Это, в свою очередь, непосредственно влияет на распространение энергии в среде. Более того, объекты таких размеров демонстрируют корпускулярно-волновой дуализм – явление, суть которого заключается в том, что такие объекты проявляют при различных условиях как свойства волн, которые кажутся групповым поведением частиц, так и классических частиц. Но, с другой стороны, волны тоже могут проявлять свойства частиц, поэтому существует особый интерес в построении аналогии между динамикой массы и динамикой энергии.

Достаточно давно известно подобие переноса массы и энергии для диффузионных процессов. Но совсем недавно началось исследование подобие между массой и энергией для динамического процесса [13].

Совершенно неважно какая природа энергии – тепловая [9], электромагнитная или любая другая, у энергетического возмущения всегда будет набор некоторых характеристик, которые могут частично или полностью описать его. Примерами таких характеристик является величина энергии, которая будет являться аналогом массы, положение энергетического центра, который будет являться аналогом положения центра масс тела или системы тел, или радиус энергетического возмущения, который является аналогом радиуса инерции тела.

Для исследования движения энергии можно рассмотреть простейшую модель – одномерную одноатомную цепочку. Механика такой модели исследовалась в [3, 4, 6–8, 11]. Более подробные сведения о свойствах и структурах кристаллов можно найти в [2, 5, 10]. Уже в такой системе можно увидеть интересные эффекты, присущие динамике энергии. Такая модель очень удобна для построения аналогии между динамикой массы и энергии. Более сложные среды, например цепочка на упругом основании, исследованная в [1],

также интересны для рассмотрения в них энергетических процессов. К тому же такая среда может служить моделью нановолокон [12, 17].

Другое усложнение цепочки одинаковых атомов – цепочка с чередующимися массами, модифицированная модель которой исследована в [14]. Именно такая модель позволяет рассматривать основные виды колебаний в кристаллах – оптические и акустические. А такой среде можно видеть, что получение уравнения движения энергетического центра – нетривиальная задача.

Объектом исследования этой выпускной квалификационной работы являются различные среды с микроструктурой: бесконечный одноатомный одномерный гармонический кристалл, бесконечный кристалл с чередованием масс и бесконечный кристалл на подложке. Предметы исследования – энергетические процессы и распространение энергии в исследуемых моделях.

Цель выпускной квалификационной работы состоит в исследовании протекающих энергетических процессов и описании их методами энергетической динамики.

Для достижения цели были поставлены следующие задачи:

1. Для каждого указанного вида кристаллов построить дисперсионные соотношения и проанализировать их;
2. Доказать законы сохранения энергии в указанных системах;
3. Рассмотреть различные формы задания первого момента энергии для кристалла с чередованием масс;
4. Показать, что энергетический центр движется с постоянной скоростью;
5. Для кристалла Гука и цепочки на упругом основании рассмотреть суперпоток энергии.

Сформулированные цель и задачи сформировали структуру данной работы. Она состоит из введения, трех глав и заключения. В каждой главе рассматриваются различные системы, для них строятся дисперсионные соотношения, выводятся законы сохранения энергии, рассматриваются первые



моменты энергии и строятся формулы для потока глобальной энергии. В первой главе рассматривается простейшая среда с микроструктурой – цепочка Гука, во второй – кристалл с чередованием масс, а в третьей – кристалл на упругом основании.

## Глава 1. Распространение энергии в одноатомном кристалле

В данной главе рассматривается простейшая модель среды с микроструктурой – одномерный одноатомный гармонический кристалл. Для него строятся дисперсионные соотношения доказываются два закона сохранения: энергии и потока энергии.

### 1.1. Уравнение динамики одноатомного кристалла

Одноатомную цепочку можно представить как бесконечную совокупность частиц одинаковой массы  $m$ , соединенных линейными пружинами жесткостью  $c$ . К тому же учитывается предположение, что взаимодействуют только соседние частицы, причем взаимодействие описывается законом Гука. Поскольку силы, действующие на частицу, подчиняются такому закону, то в дальнейшем такую систему будем называть цепочкой или кристаллом Гука. Таким образом силу, действующую на частицу с номером  $n$  можно представить в виде:

$$F_n = c(u_{n+1} - u_n) - c(u_n - u_{n-1}) = c(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}), \quad (1.1)$$

где  $n$  – номер частицы,  $u_n$  – отклонение  $n$ -ой частицы от положения равновесия. Тогда перемещения атомов в данной модели удовлетворяют следующему дифференциальному уравнению:

$$m\ddot{u}_n = c(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}), \quad n \in \mathbb{Z}, \quad (1.2)$$

где точкой обозначена производная по времени.

### 1.2. Дисперсионные соотношения цепочки Гука

Для дальнейшего исследования построим дисперсионные соотношения для данной системы. Решение уравнения (1.2) представимо в виде волновой функции:

$$u_n = Ae^{i(akn+\omega t)}, \quad (1.3)$$

где  $A$  – амплитуда волны,  $a$  – расстояние между частицами в невозмущенной цепочке,  $\omega$  – частота колебаний,  $k$  – волновое число. Вообще говоря, перемещения должны быть вещественными, в то время как правая часть уравнения (1.3) является комплексным числом. Поэтому в действительности перемещения в цепочке описываются вещественной правой частью, а само такое представление через экспоненту удобно для построения выкладок при взятии производной.

Подставляя выражение (1.3) в уравнение (1.2), получается переход от дифференциального уравнения к алгебраическому, откуда и получается дисперсионное соотношение:

$$\omega = \pm 2\sqrt{\frac{c}{m}} \sin\left(\frac{ak}{2}\right). \quad (1.4)$$

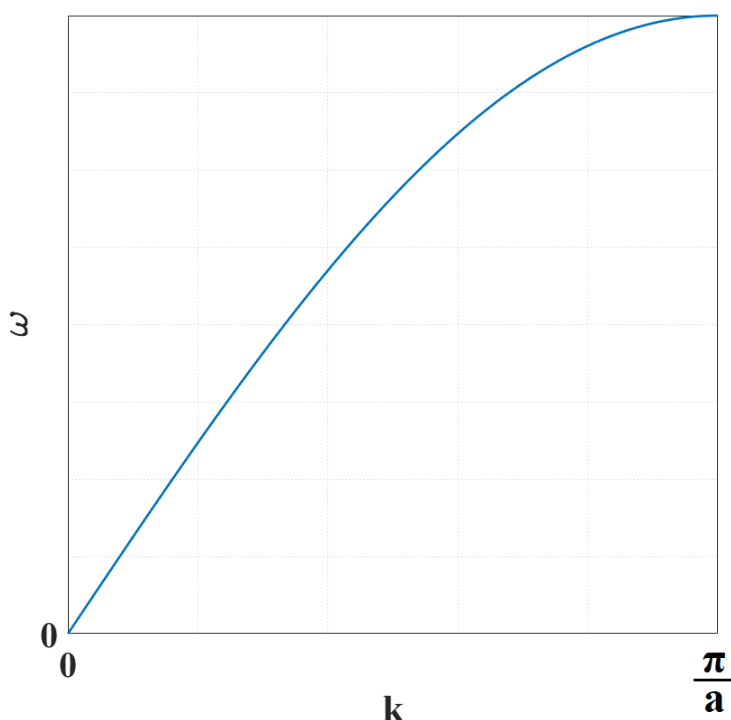


Рисунок 1.1 – Дисперсионное соотношение для кристалла Гука

Рисунок 1.1 изображен в первой четверти, потому что во всех остальных четвертях поведение зависимости частоты от волнового числа будет такое же.

Соотношение (1.4) характеризует связь между частотой и волновым числом, определяя характеристики волн, которые могут распространяться в цепочке Гука. Например, волны частотой большей, чем  $\omega_{max}$ , будут быстро затухать.

### 1.3. Элементарные энергии. Закон сохранения энергии

Для дальнейших построений введем понятие элементарной энергии, связанной с целым индексом:

$$E_n \stackrel{\text{def}}{=} \frac{mv_n^2}{2}, \quad (1.5)$$

где

$$v_n \stackrel{\text{def}}{=} \dot{u}_n, \quad (1.6)$$

и энергия, связанная с полуцелым индексом:

$$E_{n+\frac{1}{2}} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{c(u_{n+1} - u_n)^2}{2}. \quad (1.7)$$

Также для дальнейшего удобства распишем отдельно производную от скорости:

$$\dot{v}_n = \frac{c}{m}(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}). \quad (1.8)$$

Очевидно, что полная энергия в такой системе будет вычисляться по формуле:

$$E \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{n \in \mathbb{Z}} E_n + E_{n+\frac{1}{2}}. \quad (1.9)$$

Заметим, что здесь и далее будут рассматриваться возмущения, полная энергия которых конечна. Для сокращения записей будем считать, что в формуле (1.9) и далее все символы, содержащие индекс  $n$  находятся под знаком суммы.

Также заметим, что в силу бесконечности суммирования для любой последовательности  $f_n$  и для любого целого  $k$  верно:

$$\sum_{n \in \mathbb{Z}} f_n = \sum_{n \in \mathbb{Z}} f_{n+k}. \quad (1.10)$$

Покажем, что энергия в такой системе постоянна. Для этого возьмем производную:

$$\dot{E} = c \sum_{n \in \mathbb{Z}} v_n (u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) + (u_{n+1} - u_n)(v_{n+1} - v_n). \quad (1.11)$$

Отдельно рассмотрим второе слагаемое и преобразуем его, используя правило (1.9):

$$\begin{aligned} & \sum_{n \in \mathbb{Z}} (u_{n+1} - u_n)(v_{n+1} - v_n) = \\ &= \sum_{n \in \mathbb{Z}} u_{n+1}v_{n+1} + u_n v_n - u_{n+1}v_n - u_n v_{n+1} = \\ &= \sum_{n \in \mathbb{Z}} 2u_n v_n - u_n v_{n-1} - u_n v_{n+1} = \\ &= - \sum_{n \in \mathbb{Z}} v_n (u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}). \end{aligned} \quad (1.12)$$

Таким образом, подставляя последнюю формулу в (1.11), получаем закон сохранения полной энергии:

$$\dot{E} = 0 \quad \Rightarrow \quad E = \text{const}. \quad (1.13)$$

#### 1.4. Понятие $k$ -ого момента энергии

Введем в рассмотрение  $k$ -ый момент энергии:

$$\mu_k \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{n \in \mathbb{Z}/2} x_n^k E_n, \quad (1.14)$$

где символом  $\mathbb{Z}/2$  обозначено множество целых и полуцелых чисел. Заметим, что в частном случае нулевой момент энергии  $\mu_0$  есть сама энергия системы.

Несложно заметить, что данное определение похоже на определение  $k$ -ого начального момента случайной величины из теории вероятностей. Развивая

аналогию, можно понять механический смысл некоторых моментов. Например, первый момент соответствует положению энергетического центра возмущения, второй момент, будучи нормированным нужным образом, показывает «разброс» энергии около среднего значения, третий, тоже нормированный соответствующим образом, будет являться числовой характеристикой асимметрии энергетического возмущения.

### 1.5. Первый момент и поток энергии

Первый момент энергии, согласно формуле (1.13), будет иметь вид:

$$\mu_1 \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{n \in \mathbb{Z}} x_n E_n + x_{n+\frac{1}{2}} E_{n+\frac{1}{2}}, \quad x_n \stackrel{\text{def}}{=} a n. \quad (1.15)$$

Производная от него по времени:

$$ca \sum_{n \in \mathbb{Z}} n v_n (u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) + \left(n + \frac{1}{2}\right) (u_{n+1} - u_n)(v_{n+1} - v_n). \quad (1.16)$$

Снова преобразуем второе слагаемое:

$$\begin{aligned} & \sum_{n \in \mathbb{Z}} \left(n + \frac{1}{2}\right) (u_{n+1} - u_n)(v_{n+1} - v_n) = \\ & = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \left(n + \frac{1}{2}\right) (u_{n+1} v_{n+1} + u_n v_n - u_{n+1} v_n - u_n v_{n+1}) = \\ & = \sum_{n \in \mathbb{Z}} 2n u_n v_n - \left(n + \frac{1}{2}\right) u_{n+1} v_n - \left(n - \frac{1}{2}\right) u_{n-1} v_n = \\ & = \sum_{n \in \mathbb{Z}} v_n \left(n(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}) + \frac{1}{2}(u_{n-1} - u_{n+1})\right). \end{aligned} \quad (1.17)$$

Подставляя (1.15) в (1.14), получаем выражение для производной первого момента энергии:

$$\dot{\mu}_1 = \frac{ca}{2} \sum_{n \in \mathbb{Z}} v_n (u_{n-1} - u_{n+1}). \quad (1.18)$$

Поскольку  $\dot{\mu}_1$  имеет механический смысл – поток полной энергии. Поэтому в дальнейшем для удобства записи примем следующее обозначение, которое будет использоваться далее:

$$h \stackrel{\text{def}}{=} \frac{ca}{2} \sum_{n \in \mathbb{Z}} v_n (u_{n-1} - u_{n+1}). \quad (1.19)$$

Докажем, что поток энергии – постоянная величина. Для этого продифференцируем его по времени:

$$\begin{aligned} \dot{h} &= \frac{ca}{2} \sum_{n \in \mathbb{Z}} v_n (v_{n-1} - v_{n+1}) + \\ &+ \frac{c^2 a}{2m} \sum_{n \in \mathbb{Z}} (u_{n-1} - u_{n+1})(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}). \end{aligned} \quad (1.20)$$

Рассмотрим каждое слагаемое отдельно, используя правило (1.9):

$$\sum_{n \in \mathbb{Z}} v_n (v_{n-1} - v_{n+1}) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} v_n v_{n-1} - v_{n-1} v_n = 0. \quad (1.21)$$

$$\begin{aligned} &\sum_{n \in \mathbb{Z}} (u_{n-1} - u_{n+1})(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) = \\ &= \sum_{n \in \mathbb{Z}} u_{n-1} u_{n+1} - u_{n+1} u_{n-1} - 2u_{n-1} u_n + 2u_{n+1} u_n + u_{n-1}^2 - u_{n+1}^2 = 0. \end{aligned} \quad (1.22)$$

Таким образом, подставляя (1.18) и (1.19) в (1.17), получаем закон сохранения потока энергии:

$$\dot{h} = 0 \quad \Rightarrow \quad h = \text{const}. \quad (1.23)$$

## 1.6. Движение энергетического центра

Координату энергетического центра можно определить по формуле:

$$x_c(t) = \frac{\mu_1(t)}{E}. \quad (1.24)$$

Тогда скорость движения энергетического центра:

$$v_c(t) \stackrel{\text{def}}{=} \dot{x}_c(t) = \frac{h}{E} = \text{const.} \quad (1.25)$$

Тогда координату положения энергетического центра можно записать в виде:

$$x_c(t) = x_c^{(0)} + v_c t, \quad (1.26)$$

где  $x_c^{(0)}$  – положение энергетического центра в начальный момент времени. Его можно найти по формуле (1.21), подставив туда  $\mu_1(0)$ . Зависимость положения энергетического центра от времени в кристалле Гука линейная, поскольку ее коэффициенты не зависят от времени, а вычисляются исходя из начальных условий.

### 1.7. Второй момент и суперпоток энергии

Для краткости дальнейших записей введем понятие обобщенной скорости:

$$v_n = \begin{cases} \dot{u}_n, & n \in \mathbb{Z} \\ \sqrt{\frac{c}{m}} \left( u_{n-\frac{1}{2}} - u_{n+\frac{1}{2}} \right), & n \in \mathbb{Z} + \frac{1}{2} \end{cases} \quad (1.27)$$

А также введем понятие множества целых и полуцелых индексов и обозначим его  $\mathbb{Z}/2$ .

Рассмотрим второй момент энергии для кристалла на упругом основании. По формуле (1.13) он представим его в виде:

$$\mu_2 = \sum_{n \in \mathbb{Z}/2} x_n^2 E_n, \quad x_n = an. \quad (1.28)$$

А с учетом (1.27):

$$\mu_2 = a^2 \frac{m}{2} \sum_{n \in \mathbb{Z}/2} n^2 v_n^2. \quad (1.29)$$

Продифференцируем это выражение дважды по времени:

$$\ddot{\mu}_2 = a^2 \frac{m}{2} \sum_{n \in \mathbb{Z}/2} n^2 2(\dot{v}_n^2 + v_n \ddot{v}_n) \quad (1.30)$$



Заметим, что:

$$\forall n \in \mathbb{Z}/2: \dot{v}_n = \sqrt{\frac{c}{m}} \left( v_{n-\frac{1}{2}} - v_{n+\frac{1}{2}} \right), \quad (1.31)$$

тогда:

$$\begin{aligned} \ddot{\mu}_2 &= a^2 c \sum_{n \in \mathbb{Z}/2} n^2 \left( \left( v_{n-\frac{1}{2}} - v_{n+\frac{1}{2}} \right)^2 + v_n (v_{n+1} - 2v_n + v_{n-1}) \right) = \\ &= a^2 c \sum_{n \in \mathbb{Z}/2} n^2 \left( v_{n-\frac{1}{2}}^2 - 2v_{n-\frac{1}{2}}v_{n+\frac{1}{2}} + v_{n+\frac{1}{2}}^2 + v_n v_{n+1} - 2v_n^2 + v_n v_{n-1} \right). \end{aligned} \quad (1.32)$$

Далее сгруппируем некоторые слагаемые:

$$\begin{aligned} &\sum_{n \in \mathbb{Z}/2} n^2 \left( v_{n-\frac{1}{2}}^2 + v_{n+\frac{1}{2}}^2 - 2v_n^2 \right) = \\ &= \sum_{n \in \mathbb{Z}/2} v_n^2 \left( \left( n + \frac{1}{2} \right)^2 + \left( n - \frac{1}{2} \right)^2 - 2n^2 \right) = \\ &= \sum_{n \in \mathbb{Z}/2} \frac{v_n^2}{2} \end{aligned} \quad (1.33)$$

$$\begin{aligned} &\sum_{n \in \mathbb{Z}/2} n^2 \left( v_n v_{n+1} + v_n v_{n-1} - 2v_{n-\frac{1}{2}}v_{n+\frac{1}{2}} \right) = \\ &= \sum_{n \in \mathbb{Z}/2} v_{n-\frac{1}{2}}v_{n+\frac{1}{2}} \left( \left( n + \frac{1}{2} \right)^2 + \left( n - \frac{1}{2} \right)^2 - 2n^2 \right) = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{n \in \mathbb{Z}/2} v_{n-\frac{1}{2}}v_{n+\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (1.34)$$

Тогда:

$$\ddot{\mu}_2 = \frac{ca^2}{2} \sum_{n \in \mathbb{Z}/2} v_n^2 + v_{n-\frac{1}{2}}v_{n+\frac{1}{2}}. \quad (1.35)$$

Вторую производную второго момента принято обозначать  $g$  и называть суперпоток энергии:

$$g \stackrel{\text{def}}{=} \frac{ca^2}{2} \sum_{n \in \mathbb{Z}/2} v_n^2 + v_{n-\frac{1}{2}} v_{n+\frac{1}{2}}. \quad (1.36)$$

Продифференцируем его по времени:

$$\begin{aligned} \dot{g} = \frac{ca^2}{2} \sqrt{\frac{c}{m}} \sum_{n \in \mathbb{Z}/2} 2v_n \left( v_{n-\frac{1}{2}} - v_{n+\frac{1}{2}} \right) + (v_{n-1} - v_n) v_{n+\frac{1}{2}} + \\ + (v_n - v_{n+1}) v_{n-\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (1.37)$$

Рассмотрим отдельно первое слагаемое:

$$\sum_{n \in \mathbb{Z}/2} 2v_n v_{n-\frac{1}{2}} - 2v_n v_{n+\frac{1}{2}} = \sum_{n \in \mathbb{Z}/2} 2v_n v_{n-\frac{1}{2}} - 2v_{n-\frac{1}{2}} v_n = 0. \quad (1.38)$$

А также второе и третье вместе:

$$\begin{aligned} \sum_{n \in \mathbb{Z}/2} v_{n-1} v_{n+\frac{1}{2}} - v_n v_{n+\frac{1}{2}} + v_n v_{n-\frac{1}{2}} - v_{n+1} v_{n-\frac{1}{2}} = \\ = \sum_{n \in \mathbb{Z}/2} v_{n-1} v_{n+\frac{1}{2}} - v_n v_{n+\frac{1}{2}} + v_{n+\frac{1}{2}} v_n - v_{n+\frac{1}{2}} v_{n-1} = 0. \end{aligned} \quad (1.39)$$

Таким образом:

$$\dot{g} = 0 \quad \Rightarrow \quad g = \text{const}. \quad (1.40)$$

## 1.8. Энергетический радиус

По аналогии со стандартным отклонением случайной величины можно ввести понятие энергетического радиуса. Для этого требуется нормировать второй момент на энергию, а далее по аналогии со стандартным разбросом случайной величины взять корень из получившегося выражения:

$$\rho(t) \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\frac{\mu_2^*(t)}{E}}, \quad (1.41)$$

где  $\mu_2^*$  – второй центральный момент энергии. Он определяется как:

$$\mu_2^* = \sum_{n \in \mathbb{Z}/2} (x_n - x_c)^2 E_n. \quad (1.42)$$

Заметим, что:

$$\mu_2^* = \mu_2 + x_c^2 E. \quad (1.43)$$

Продифференцируем последнее выражение дважды:

$$g^* = g + 2x_c h. \quad (1.44)$$

и еще раз:

$$\dot{g}^* = \dot{g} = 0 \quad \Rightarrow \quad g^* = \text{const}. \quad (1.45)$$

Поэтому суперпоток, полученный с помощью второго центрального момента будет сохраняться, а сам момент в таком случае квадратично зависит от времени:

$$\mu_2^*(t) = \xi_1 t^2 + \xi_2 t + \xi_3, \quad (1.46)$$

заметим, что коэффициенты  $\xi_k$  можно определить из начальных условий, не вычисляя перемещения и скорости частиц в цепочке.

Более удобно представить энергетический радиус как:

$$\rho(t) \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\rho_{min}^2 + v_p (t - t^*)^2}, \quad (1.47)$$

где  $\rho_{min}$  – минимальный энергетический радиус,  $v_p$  – скорость расплывания возмущения и  $t^*$  – время фокусировки возмущения [13].

## 1.9. Заключение к главе 1

В данной главе рассмотрена классическая модель дискретной среды с микроструктурой – цепочка Гука; для нее выведено дисперсионное соотношение, доказан закон сохранения энергии.

Кроме того, было введено понятие  $k$ -ого момента энергии и для первых трех рассмотрен их механический смысл. Более подробно рассмотрен первый и второй моменты энергии, доказано, что его производная первого момента времени и вторая производная второго – постоянные величины.

Помимо этого, в данной главе были подробно приведены строгие математические преобразования и выкладки, которые частично будут использоваться в следующих главах.

## Глава 2. Распространение энергии в кристалле с чередованием масс

Во второй главе рассматривается усложнение одноатомного кристалла – цепочка с чередованием масс, а также подробно рассматривается первый момент энергии и его производная – поток энергии для такой цепочки.

### 2.1. Уравнение динамики кристалла с чередованием масс

Рассматриваемая система представляет собой цепочку, где встречаются частицы с разной массой. При этом предположение о том, что взаимодействуют только ближайšie соседние частицы, остается справедливым и для данной системы.

Уравнение динамики одноатомного кристалла (1.2) можно модифицировать к следующему виду:

$$m_n \ddot{u}_n = c(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}), \quad n \in \mathbb{Z}, \quad (2.1)$$

где  $n$  – номер частицы,  $c$  – жесткость пружин,  $u_n$  – перемещение  $n$ -ой частицы, точкой обозначена производная по времени  $m_n$  – масса частиц, ее можно представить в виде:

$$m_n = \begin{cases} m_1, & n = 2k + 1 \\ m_2, & n = 2k \end{cases}, \quad k \in \mathbb{Z}. \quad (2.2)$$

### 2.2. Дисперсионные соотношения кристалла с чередованием масс

Вывод дисперсионных соотношений для цепочки с чередованием масс аналогичен выводу для кристалла Гука. Подставляя выражение (1.3) в уравнения движения (2.2) можно получить дисперсионное соотношение:

$$\omega = \frac{c}{m_1 m_2} \left( m_1 + m_2 \pm \sqrt{m_1^2 + m_2^2 + 2m_1 m_2 \cos(ak)} \right). \quad (2.3)$$

Соотношение (2.3) имеет 2 корня, это значит, что каждому волновому числу  $k$  соответствует две волны с разной частотой  $\omega$ . Ветвь, которая

соответствует (2.3) со знаком плюс, называется оптической, а со знаком минус – акустической.

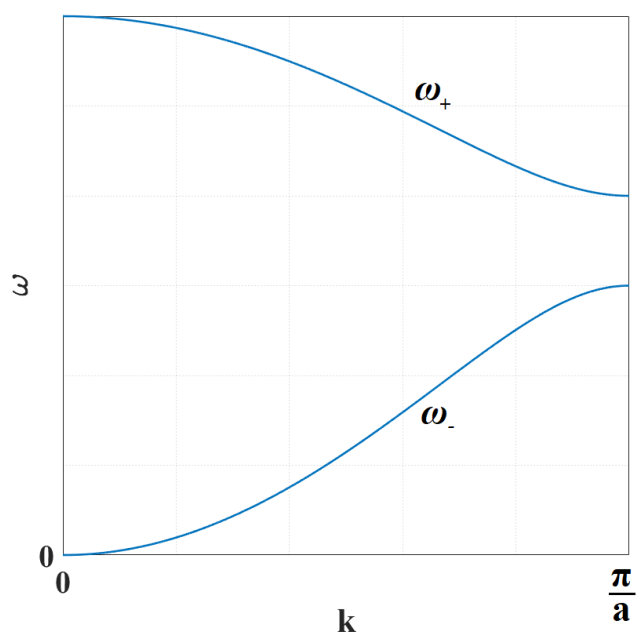


Рисунок 2.1 – Дисперсионные соотношения для цепочки с чередованием масс в случае  $m_2 = 2m_1$

При этом колебания частиц на оптической ветви происходят в противофазе с амплитудами, обратно пропорциональными массам. Колебания на акустической ветви происходят таким же образом, как и в цепочке Гука – соседние частицы разной массы двигаются в одной фазе. Наглядно это можно увидеть на рисунке 2.2.

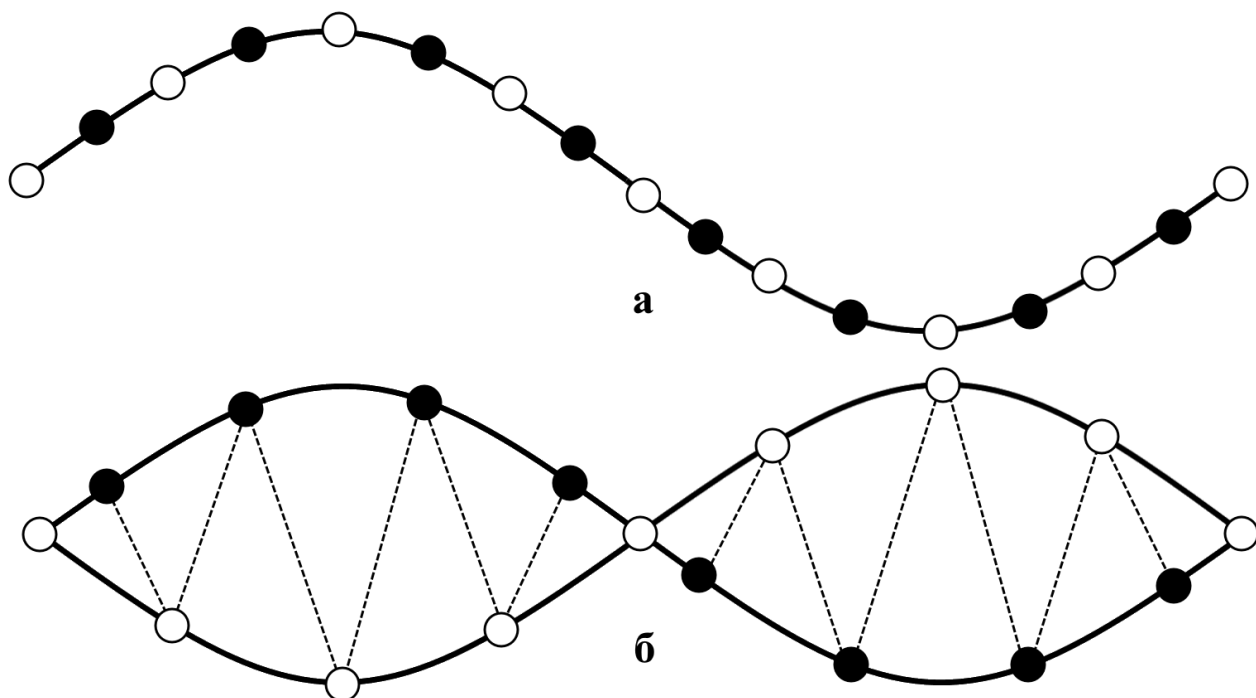


Рисунок 2.2 – Колебания частиц в двухатомной цепочке в одной фазе (а) и в противофазе (б)

### 2.3. Закон сохранения энергии

Для дальнейших построений введем понятие элементарной энергии, связанной с целым индексом:

$$E_n \stackrel{\text{def}}{=} \frac{m_n v_n^2}{2}. \quad (2.4)$$

Отличия от главы 1 состоит в том, что теперь массы различны, поэтому у массы есть индекс, а определятся из формулы (2.2). А энергия, связанная с полуцелым индексом такая же, как в главе 1:

$$E_{n+\frac{1}{2}} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{c(u_{n+1} - u_n)^2}{2}. \quad (2.5)$$

Также для дальнейшего удобства распишем отдельно производную от скорости:

$$\dot{v}_n = \frac{c}{m_n}(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}). \quad (2.6)$$

Очевидно, что полная энергия в такой системе будет вычисляться по формуле, аналогично предыдущей главе:

$$E \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{n \in \mathbb{Z}} E_n + E_{n+\frac{1}{2}}. \quad (2.7)$$

Покажем, что энергия в кристалле с чередованием масс постоянна. Для этого возьмем производную. Отметим, что  $m_n$  сокращается, поэтому отличий от цепочки Гука в данной формуле не будет:

$$\dot{E} = c \sum_{n \in \mathbb{Z}} v_n(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) + (u_{n+1} - u_n)(v_{n+1} - v_n). \quad (2.8)$$

Согласно формулам (1.12), второе слагаемое принимает вид

$$\begin{aligned} & \sum_{n \in \mathbb{Z}} (u_{n+1} - u_n)(v_{n+1} - v_n) = \\ & = - \sum_{n \in \mathbb{Z}} v_n(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}). \end{aligned} \quad (2.9)$$

Поэтому правая часть в уравнении (2.8) обращается в ноль, следовательно выводится закон сохранения полной энергии для кристалла с чередованием масс:

$$\dot{E} = 0 \Rightarrow E = \text{const}. \quad (2.10)$$

Более того, можно заметить, что в данных выкладках не использовался конкретный вид для  $m_n$ , то есть закон сохранения энергии доказан для цепочки с произвольным распределением масс.

#### 2.4. Первый момент и поток энергии

Зададим первый момент энергии таким же образом, как и в прошлой главе:

$$\mu_1 = \sum_{n \in \mathbb{Z}} x_n E_n + x_{n+\frac{1}{2}} E_{n+\frac{1}{2}}, \quad x_n = an. \quad (2.11)$$

Производная от него по времени:



$$ca \sum_{n \in \mathbb{Z}} n v_n (u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) + \left(n + \frac{1}{2}\right) (u_{n+1} - u_n) (v_{n+1} - v_n). \quad (2.12)$$

Снова преобразуем второе слагаемое, аналогично (1.17):

$$\begin{aligned} & \sum_{n \in \mathbb{Z}} \left(n + \frac{1}{2}\right) (u_{n+1} - u_n) (v_{n+1} - v_n) = \\ & = \sum_{n \in \mathbb{Z}} v_n \left(n(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}) + \frac{1}{2}(u_{n-1} - u_{n+1})\right). \end{aligned} \quad (2.13)$$

Таким образом, подставляя последнюю формулу в (2.12) получаем выражение для производной первого момента энергии для кристалла с чередованием масс:

$$\dot{\mu}_1 = \frac{ca}{2} \sum_{n \in \mathbb{Z}} v_n (u_{n-1} - u_{n+1}). \quad (2.14)$$

Как было указано в предыдущей главе, производную первого момента энергии принято обозначать  $h$  и называть потоком полной энергии. Поэтому обозначим последнее выражение:

$$h \stackrel{\text{def}}{=} \frac{ca}{2} \sum_{n \in \mathbb{Z}} v_n (u_{n-1} - u_{n+1}). \quad (2.15)$$

Заметим, что полученное выражение в формулах не отличается от полученного в прошлой главе, как и в формуле (2.8). Это связано с тем, что при взятии производной сокращаются массы  $m_n$ . Так же отметим, что в полученных формулах нигде не фигурировал конкретный вид функции  $m_n$ , поэтому поток энергии будет иметь вид (2.15) в кристалле с произвольным распределением масс частиц и одинаковыми жесткостями пружин.

Выведем выражение для производной потока энергии для цепочки с чередованием масс:

$$\begin{aligned} \dot{h} &= \frac{ca}{2} \sum_{n \in \mathbb{Z}} v_n (v_{n-1} - v_{n+1}) + \\ &+ \frac{c^2 a}{2} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{1}{m_n} (u_{n-1} - u_{n+1})(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}). \end{aligned} \quad (2.16)$$

Отметим, что здесь уже проявляются отличия от кристалла Гука, потому что массы частиц, во-первых, различны, а во-вторых, зависят от индекса, поэтому ее нельзя вынести за знак суммы. Упростим выражение (2.16), согласно (1.21) первое слагаемое под знаком суммы 0. Таким образом остается:

$$\dot{h} = \frac{c^2 a}{2} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{1}{m_n} (u_{n-1} - u_{n+1})(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}). \quad (2.17)$$

Распишем это выражение подробнее:

$$\begin{aligned} &\sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{1}{m_n} (u_{n-1} - u_{n+1})(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) = \\ &= \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{u_{n-1}u_{n+1} - u_{n+1}u_{n-1} - 2u_{n-1}u_n + 2u_{n+1}u_n + u_{n-1}^2 - u_{n+1}^2}{m_n} = \\ &= \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{2u_{n+1}u_n - 2u_{n-1}u_n + u_{n-1}^2 - u_{n+1}^2}{m_n}. \end{aligned} \quad (2.18)$$

Последнее представление также верно для кристалла с произвольным распределением масс. Для дальнейших построений конкретизируем вид  $m_n$  для цепочки с чередованием масс. Будем использовать представление (2.2). Несложно заметить, что для любого целого  $k$  будет верно следующее:

$$m_n = m_{n+2k}. \quad (2.19)$$

Используя это правило, упростим (2.18):

$$\begin{aligned} &\sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{2u_{n+1}u_n - 2u_{n-1}u_n + u_{n-1}^2 - u_{n+1}^2}{m_n} = \\ &= \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{2u_{n+1}u_n - 2u_{n-1}u_n}{m_n} = 2 \sum_{n \in \mathbb{Z}} \left( \frac{1}{m_n} - \frac{1}{m_{n+1}} \right) u_{n+1}u_n \end{aligned} \quad (2.20)$$

Таким образом, подставляя выражения (2.20) и (2.18) в формулу (2.17), получаем следующий вид для производной потока энергии:

$$\dot{h} = c^2 a \sum_{n \in \mathbb{Z}} \left( \frac{1}{m_n} - \frac{1}{m_{n+1}} \right) u_{n+1} u_n. \quad (2.21)$$

Данная форма удобна для проверки полученного результата. В предположении, что  $m_n = m_{n+1}$  под знаком суммы будет ноль, что согласуется с результатами для цепочки Гука, где производная потока энергии была нуль.

Представим производную потока энергии в ином виде. Для этого введем понятие коэффициента отношения масс:

$$\gamma = \frac{m_2}{m_1}. \quad (2.22)$$

Тогда рассмотрим отдельно два возможных случая вида коэффициента, зависящего от масс под знаком суммы. Случай первый  $n$  – четное число:

$$\frac{1}{m_n} - \frac{1}{m_{n+1}} = \frac{1}{\gamma m_1} - \frac{1}{m_1} = \left( \frac{1}{\gamma} - 1 \right) \frac{1}{m_1}. \quad (2.23)$$

И случай второй  $n$  – нечетное число:

$$\frac{1}{m_n} - \frac{1}{m_{n+1}} = \frac{1}{m_1} - \frac{1}{\gamma m_1} = \left( 1 - \frac{1}{\gamma} \right) \frac{1}{m_1}. \quad (2.24)$$

Как можно заметить, итоговые выражения (2.23) и (2.24) отличаются только знаком, тогда:

$$\frac{1}{m_n} - \frac{1}{m_{n+1}} = \left( \frac{1}{\gamma} - 1 \right) \frac{1}{m_1}, \quad (2.24)$$

где  $\gamma$  и  $m_1$  являются константами, то есть их можно вынести из-под знака суммирования. Тогда формула для производной потока энергии (2.21) принимает вид:

$$\dot{h} = \frac{c^2 a}{m_1} \left( \frac{1}{\gamma} - 1 \right) \sum_{n \in \mathbb{Z}} (-1)^n u_{n+1} u_n. \quad (2.25)$$

Очевидно, что дальнейшие упрощения данной формулы уже бесполезны, поэтому при задании первого момента в виде (2.11) поток энергии для кристалла с чередованием масс не сохраняется.

При этом интересно отметить частный случай «симметричного» относительно цепочки возмущения, например, в виде удара по любой частице. Без ущерба общности обозначим частицу, по которой был произведен удар, номером ноль. Тогда, в силу симметрии возмущения, движение частиц слева и справа от него будет одинаковым, то есть в любой момент времени:

$$\forall j \in \mathbb{N}: u_j = u_{-j}. \quad (2.26)$$

Распишем несколько слагаемых в (2.25):

$$\sum_{n \in \mathbb{Z}} (-1)^n u_{n+1} u_n = \dots + u_{-1} u_{-2} - u_0 u_{-1} + u_1 u_0 - u_2 u_1 + \dots \quad (2.27)$$

Тогда если использовать правило (2.26), можно заметить, что:

$$\sum_{n \in \mathbb{Z}} (-1)^n u_{n+1} u_n = 0, \quad (2.28)$$

таким образом в частном случае симметричного возмущения:

$$\dot{h} = 0 \Rightarrow h = \text{const}. \quad (2.29)$$

Более того, если рассмотреть сам первый момент энергии (2.11) будет равен нулю для симметричного возмущения. Докажем это.

$$E_{n+\frac{1}{2}} = \frac{c(u_{n+1} - u_n)^2}{2} = \frac{c(u_{-n-1} - u_{-n})^2}{2} = E_{-n-\frac{1}{2}}. \quad (2.30)$$

А также заметим, что (2.26) верно для момента времени, то

$$\forall j \in \mathbb{N}: \dot{u}_j = \dot{u}_{-j} \Rightarrow v_j = v_{-j}, \quad (2.31)$$

и ясно, что при таком возмущении массы частиц с номерами  $n$  и  $-n$  одинаковы, следовательно:

$$E_n = \frac{m_n v_n^2}{2} = \frac{m_n v_{-n}^2}{2} = E_{-n}. \quad (2.32)$$

Распишем несколько слагаемых из первого момента энергии (2.11):

$$\frac{\mu_1}{a} = \dots - E_{-1} - \frac{1}{2}E_{-\frac{1}{2}} + 0 + \frac{1}{2}E_{\frac{1}{2}} + E_1 + \dots = 0, \quad (2.33)$$

что и требовалось доказать. Но если  $\mu_1 = 0$ , то формуле (1.24) положение энергетического центра тоже равно нулю. То есть при симметричном относительно цепочки возмущении поток энергии сохраняется, а сам энергетический центр не двигается.

Заметим, что если бы удар производился не по нулевой частице, а по некоторой другой, то значение первого момента энергии было бы постоянным, как и положение энергетического центра.

## 2.5. Первый момент энергии с непостоянными коэффициентами

Как стало ясно из формулы (2.25), поток энергии в общем случае не сохраняется в цепочке с чередованием масс, если задать первый момент аналогично тому, как он задавался для кристалла Гука. Первое решение, которое может показаться выходом из такой ситуации – немного сдвинуть коэффициенты при потенциальных энергиях в сторону больших или меньших масс.

Поменяем вид первого момента энергии, введя некоторый коэффициент  $\alpha \in \left[-\frac{1}{2}; \frac{1}{2}\right]$ , который будем определять:

$$\mu_1 = a \sum_{n \in \mathbb{Z}} n E_n + \left(n + \frac{1}{2} + (-1)^n \alpha\right) E_{n+\frac{1}{2}}. \quad (2.34)$$

Продифференцируем (2.34) по времени:

$$\begin{aligned} \dot{\mu}_1 = ca \sum_{n \in \mathbb{Z}} n v_n (u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) + \\ + \left(n + \frac{1}{2} + (-1)^n \alpha\right) (u_{n+1} - u_n)(v_{n+1} - v_n). \end{aligned} \quad (2.35)$$

И рассмотрим отдельно второе слагаемое под знаком суммы, с учетом (1.17):

$$\begin{aligned}
& \sum_{n \in \mathbb{Z}} \left( n + \frac{1}{2} + (-1)^n \alpha \right) (u_{n+1} - u_n)(v_{n+1} - v_n) = \\
& = \sum_{n \in \mathbb{Z}} v_n \left( n(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}) + \frac{1}{2}(u_{n-1} - u_{n+1}) \right) + \\
& \quad + (-1)^n \alpha (u_{n+1} - u_n)(v_{n+1} - v_n).
\end{aligned} \tag{2.36}$$

В последнем выражении снова рассмотрим второе слагаемое под знаком суммы:

$$\begin{aligned}
& \sum_{n \in \mathbb{Z}} (-1)^n \alpha (u_{n+1} - u_n)(v_{n+1} - v_n) = \\
& = \sum_{n \in \mathbb{Z}} (-1)^n \alpha (u_{n+1}v_{n+1} + u_n v_n - u_{n+1}v_n - u_n v_{n+1}) = \\
& = \sum_{n \in \mathbb{Z}} (-1)^n \alpha (-u_n v_n + u_n v_n - u_{n+1}v_n + u_{n-1}v_n) = \\
& \quad = \sum_{n \in \mathbb{Z}} (-1)^n \alpha v_n (u_{n-1} - u_{n+1}).
\end{aligned} \tag{2.37}$$

Тогда подставляя последние два выражения в (2.35), получаем выражение для потока полной энергии:

$$\dot{\mu}_1 = h = ca \sum_{n \in \mathbb{Z}} \left[ \frac{1}{2} + (-1)^n \alpha \right] v_n (u_{n-1} - u_{n+1}), \tag{2.38}$$

что в частном случае при  $\alpha$  равном нулю согласуется с полученной ранее формулой (2.14). Продифференцируем выражение для потока энергии:

$$\begin{aligned}
\dot{h} & = ca \sum_{n \in \mathbb{Z}} \left[ \frac{1}{2} + (-1)^n \alpha \right] v_n (v_{n-1} - v_{n+1}) + \\
& + \left[ \frac{1}{2} + (-1)^n \alpha \right] \frac{c}{m_n} (u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1})(u_{n-1} - u_{n+1}).
\end{aligned} \tag{2.39}$$

Рассмотрим отдельно слагаемое первое слагаемое, с учетом (1.21) и (1.10):

$$\sum_{n \in \mathbb{Z}} \left[ \frac{1}{2} + (-1)^n \alpha \right] v_n (v_{n-1} - v_{n+1}) = \tag{2.40}$$

$$= \sum_{n \in \mathbb{Z}} (-1)^n \alpha v_n (v_{n-1} - v_{n+1}) = 2\alpha \sum_{n \in \mathbb{Z}} (-1)^n v_n v_{n-1}$$

Очевидно, что данное слагаемое уже не будет обращаться в нуль при любом  $\alpha$  отличным от нуля, а значит поток энергии не сохраняется. При этом случай  $\alpha$  равный нулю соответствует (2.17), где поток энергии тоже не сохранялся. Значит, подход с непостоянным коэффициентом при потенциальной энергии не приводит к тому, что поток энергии сохраняется.

Более того, если рассмотреть частный случай  $m_n = const$ , то есть кристалл Гука, то в формуле (2.39) будет отсутствовать второе слагаемое в силу (1.22). Откуда можно сделать вывод о том, что при задании первого момента энергии в виде (2.34) и при  $\alpha$  не равным нулю, поток энергии даже в одноатомной цепочке сохраняться не будет.

## 2.6. Первый момент энергии с полуцелыми индексами

С другой стороны, можно рассмотреть форму потока энергии, когда плечо считается до ячейки периодичности, а суммирование вести уже только по четным индексам – центрам ячеек периодичности. Заметим, что суммирование ведется по целым и полуцелым индексам, поэтому есть дополнительный нормировочный коэффициент в виде одной второй, чтобы каждая элементарная энергия в сумме участвовала лишь единожды.

$$\mu_1 = \frac{a}{2} \sum_{n \in \mathbb{Z}/2} n \left( \frac{1}{2} E_{2n-1} + E_{2n-\frac{1}{2}} + E_{2n} + E_{2n+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} E_{2n+1} \right). \quad (2.41)$$

Здесь и далее принимается, что символом  $\mathbb{Z}/2$  обозначается множество целым и полуцелых чисел. Продифференцируем (2.41) выражение по времени, учитывая (2.2) и (2.6), а также вынося жесткость пружин за знак суммы:

$$\begin{aligned}
\dot{\mu}_1 = \frac{ca}{2} \sum_{n \in \mathbb{Z}/2} n & (v_{2n-1}(u_{2n-2} - 2u_{2n-1} + u_{2n}) \\
& + (u_{2n} - u_{2n-1})(v_{2n} - v_{2n-1}) \\
& + v_{2n}(u_{2n-1} - 2u_{2n} + u_{2n+1}) \\
& + (u_{2n+1} - u_{2n})(v_{2n+1} - v_{2n}) \\
& + v_{2n+1}(u_{2n} - 2u_{2n+1} + u_{2n+2}))
\end{aligned} \tag{2.42}$$

Приведем подобные слагаемые, собирая коэффициенты при различных скоростях. Прежде всего покажем, что коэффициент перед  $v_{2n}$  обращается в нуль:

$$v_{2n}(u_{2n-1} - 2u_{2n} + u_{2n+1} + u_{2n} - u_{2n-1} + u_{2n} - u_{2n+1}) = 0 \tag{2.43}$$

Тогда (2.42) принимает вид:

$$\dot{\mu}_1 = \frac{ca}{4} \sum_{n \in \mathbb{Z}/2} n (v_{2n-1}(u_{2n-2} - u_{2n}) + v_{2n+1}(u_{2n+2} - u_{2n})) \tag{2.44}$$

Во втором слагаемом перенесем индекс на две целых влево, учитывая, что вместо  $n$  будет  $(n - 2)$  и приведем подобные слагаемые при  $n$  и при свободном коэффициенте:

$$\begin{aligned}
\dot{\mu}_1 = \frac{ca}{4} \sum_{n \in \mathbb{Z}/2} n & (v_{2n-1}(u_{2n-2} - u_{2n} + u_{2n} - u_{2n-2})) - \\
& - \frac{ca}{2} \sum_{n \in \mathbb{Z}/2} v_{2n-1}(u_{2n} - u_{2n-2})
\end{aligned} \tag{2.45}$$

Очевидно, что в первая сумма в (2.45) равна нулю. Сразу говоря, что производная первого момента – поток энергии, получаем выражение для глобального потока энергии:

$$h = -\frac{ca}{2} \sum_{n \in \mathbb{Z}/2} v_{2n-1}(u_{2n} - u_{2n-2}). \tag{2.46}$$

Полученное выражение продифференцируем по времени, чтобы проанализировать поведение данной величины.



$$\begin{aligned} \dot{h} = & -\frac{ca}{2} \sum_{n \in \mathbb{Z}/2} \frac{c}{m_1} (u_{2n-2} - 2u_{2n-1} + u_{2n})(u_{2n} - u_{2n-2}) \\ & + v_{2n-1}(v_{2n} - v_{2n-2}). \end{aligned} \quad (2.47)$$

Заметим, что благодаря (1.10) и (1.21), а также суммированию по целым и полуцелым индексам:

$$\sum_{n \in \mathbb{Z}/2} v_{2n-1}(v_{2n} - v_{2n-2}) = \sum_{n \in \mathbb{Z}/2} v_{2n-1}v_{2n} - v_{2n}v_{2n-1} = 0. \quad (2.48)$$

Также с учетом суммирования по целым и полуцелым индексам:

$$\begin{aligned} & \sum_{n \in \mathbb{Z}/2} (u_{2n-2} - 2u_{2n-1} + u_{2n})(u_{2n} - u_{2n-2}) = \\ & = \sum_{n \in \mathbb{Z}/2} (-u_{2n-2}^2 - 2u_{2n-1}u_{2n} + 2u_{2n-1}u_{2n-2} + u_{2n}^2) = 0 \end{aligned} \quad (2.49)$$

Таким образом:

$$\dot{h} = 0 \Rightarrow h = \text{const}, \quad (2.50)$$

то есть поток энергии сохраняется для кристалла с чередованием масс. Заметим, что без ущерба общности в центре ячейки периодичности можно было поместить частицу с массой  $m_2$ , при этом основная идея выкладок не изменяется.

## 2.7. Заключение к главе 2

В данной главе рассматривалась модификация кристалла Гука – цепочка с чередованием масс; для данной модели выведено дисперсионное соотношение, а также доказан закон сохранения энергии.

Также были подробно рассмотрены три формы задания первого момента энергии. Показано, что при задании первого момента энергии прямым методом без различных усложнений, поток энергии есть непостоянная величина. Было выявлено, что задание непостоянных коэффициентов перед энергиями не приводит к закону сохранения потока энергии даже в кристалле Гука. Кроме

этого, приведена форма задания первого момента энергии, при котором поток энергии сохраняется.

Из-за (1.24)–(1.26) ясно, что при задании первого момента энергии как (2.41), энергетический центр будет двигаться с постоянной скоростью.

### Глава 3. Распространение энергии в кристалле на подложке

В данной главе рассматривается кристалл на упругом основании. Для него строится дисперсионное соотношения, а также доказываются законы сохранения.

#### 3.1. Уравнение динамики кристалла на подложке

Другое усложнение кристалла Гука – кристалл на подложке. Эта система представляет собой одноатомную цепочку на упругом основании. Более наглядно это можно увидеть на рисунке 3.1.

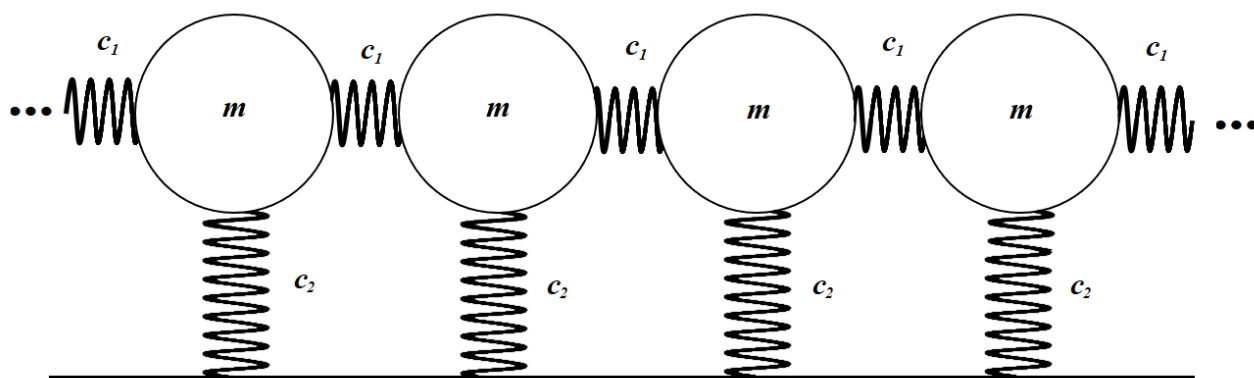


Рисунок 3.1 – Кристалл на подложке

Предполагается, что пружины, лежащие в основании, подчиняются линейному закону. В таком случае уравнение динамики (1.2) модифицируются к следующему виду:

$$m\ddot{u}_n = c_1(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) - c_2u_n, \quad n \in \mathbb{Z}, \quad (3.1)$$

где  $n$  – номер частицы,  $m$  – масса частиц,  $c_1$  – жесткость пружин, соединяющих соседние частицы,  $c_2$  – жесткость пружин, соединяющих частицы и неподвижное основание,  $u_n$  – перемещение  $n$ -ой частицы, точкой обозначена производная по времени.

### 3.2. Дисперсионные соотношения кристалла на подложке

Вывод дисперсионных соотношений для кристалла на подложке аналогичен выводу для одноатомной цепочки. Подставляя выражение (1.3) в уравнения движения (3.1) можно получить дисперсионное соотношение:

$$\omega = \pm \sqrt{4 \frac{c_1}{m} \sin^2 \left( \frac{ak}{2} \right) + \frac{c_2}{m}}. \quad (3.2)$$

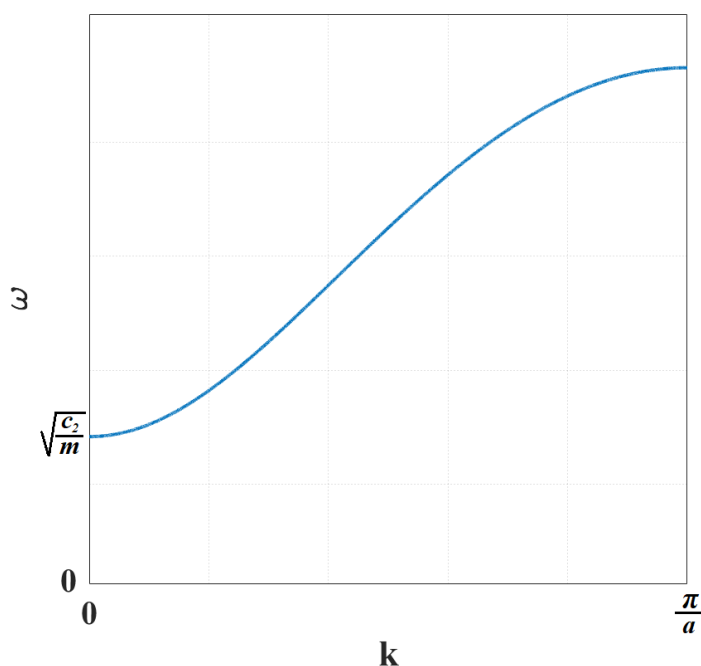


Рисунок 3.2 – Дисперсионное соотношение для кристалла на подложке

Как видно из рисунка 3.2 в данной системе быстро затухают волны, частота которых меньше частоты отсечки  $\omega_{\text{отс}} = \sqrt{\frac{c_2}{m}}$ .

### 3.3. Элементарные энергии. Закон сохранения энергии

Рассмотрим элементарные энергии, связанные с целым индексом:

$$E_n = \frac{mv_n^2}{2} + \frac{c_2 u_n^2}{2}, \quad (3.3)$$

и энергию, связанную с полуцелым индексом:

$$E_{n+\frac{1}{2}} = \frac{c_1(u_{n+1} - u_n)^2}{2}. \quad (3.4)$$

Заметим, что в данном случае производная от скорости будет иметь иной вид, а именно:

$$\dot{v}_n = \frac{c_1}{m}(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) - \frac{c_2}{m}u_n. \quad (3.5)$$

Выведем закон сохранения полной энергии:

$$E \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{n \in \mathbb{Z}} E_n + E_{n+\frac{1}{2}}. \quad (3.6)$$

Продифференцируем выражение (3.6) по времени:

$$\dot{E} = \sum_{n \in \mathbb{Z}} m v_n \dot{v}_n + c_2 u_n v_n + c_1 (u_{n+1} - u_n) (v_{n+1} - v_n), \quad (3.7)$$

подставим (3.5) в (3.7) и заметим, что слагаемые, содержащие жесткость пружин, лежащих в упругом основании, сокращаются:

$$\dot{E} = \sum_{n \in \mathbb{Z}} v_n c_1 (u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) + c_1 (u_{n+1} - u_n) (v_{n+1} - v_n). \quad (3.8)$$

Последняя формула полностью совпадает с (1.11), поэтому:

$$\dot{E} = 0 \quad \Rightarrow \quad E = \text{const}. \quad (3.9)$$

### 3.4. Первый момент и поток энергии

Зададим первый момент энергии следующим образом:

$$\mu_1 = \sum_{n \in \mathbb{Z}} x_n E_n + x_{n+\frac{1}{2}} E_{n+\frac{1}{2}}, \quad x_n = an. \quad (3.10)$$

Производная от него по времени:

$$c_1 a \sum_{n \in \mathbb{Z}} n v_n (u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) + \left(n + \frac{1}{2}\right) (u_{n+1} - u_n) (v_{n+1} - v_n), \quad (3.11)$$

заметим, что слагаемые, содержащие жесткость подложки сократились, поэтому последняя формула аналогична (1.16), а значит

$$h = \frac{c_1 a}{2} \sum_{n \in \mathbb{Z}} v_n (u_{n-1} - u_{n+1}). \quad (3.12)$$

Продифференцируем последнее выражение по времени:

$$\begin{aligned} \dot{h} = \frac{c_1 a}{2} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \left( \frac{c_1}{m} (u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) - \frac{c_2}{m} u_n \right) (u_{n-1} - u_{n+1}) + \\ + v_n (v_{n-1} - v_{n+1}). \end{aligned} \quad (3.13)$$

Очевидно, что из-за (1.21):

$$\sum_{n \in \mathbb{Z}} u_n (u_{n-1} - u_{n+1}) = 0 \quad (3.14)$$

и

$$\sum_{n \in \mathbb{Z}} v_n (v_{n-1} - v_{n+1}) = 0. \quad (3.15)$$

Также благодаря (1.22) ясно, что

$$\dot{h} = 0 \Rightarrow h = \text{const}. \quad (3.16)$$

Таким образом поток энергии в кристалле на упругом основании сохраняется.

### 3.5. Второй момент и суперпоток энергии

Рассмотрим второй момент энергии для кристалла на упругом основании.

По формуле (1.13) представим его в виде:

$$\mu_2 = \sum_{n \in \mathbb{Z}/2} x_n^2 E_n, \quad x_n = an. \quad (3.17)$$

В данном случае будем учитывать результаты из параграфа 1.7 из первой главы, поэтому далее будем добавлять только слагаемые, которые отвечают за жесткость основания. Продифференцируем (3.17) выражение дважды по времени:

$$g \stackrel{\text{def}}{=} \frac{c_1 a^2}{m} E + \frac{c_1 a^2}{2} \sum_{n \in \mathbb{Z}} v_n v_{n-1} + \frac{c_1}{m} u_{n+1} u_{n-1} + \frac{c_2}{m} u_n u_{n-1}. \quad (3.18)$$

Рассмотрим его производную, учитывая, что производная первого слагаемого ноль, а части производных от скоростей, содержащие  $c_1$ , сократятся со вторым слагаемым по (1.37) – (1.39):

$$\dot{g} = \frac{c_1 c_2 a^2}{2m} \sum_{n \in \mathbb{Z}} -u_n v_{n-1} - v_n u_{n-1} + v_n u_{n-1} + u_n v_{n-1} = 0. \quad (3.19)$$

Таким образом:

$$\dot{g} = 0 \Rightarrow g = const. \quad (3.20)$$

### 3.6. Выводы к главе 3

В данной главе рассматривалась цепочка на упругом основании; для нее выведено дисперсионное соотношение, а также доказан закон сохранения энергии.

Для кристалла на подложке рассмотрен первый момент энергии. Показано, что для такой системы поток энергии сохраняется, а значит и в такой системе энергетический центр возмущения движется равномерно.

Также был рассмотрен второй момент энергии. Доказано, что суперпоток в кристалле на упругом основании – постоянная величина.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

«Механика – наука о движении, а так как все в природе движется, то механика – наука обо всем.»

© П.А. Жилин.

В данной выпускной квалификационной работе исследовались три модели сред с микроструктурой: бесконечный одноатомный и двухатомный кристаллы, а также бесконечная цепочка на упругом основании. Было рассмотрено понятие  $k$ -ого момента энергии, а также для некоторых первых моментов описан их механический смысл. Для всех цепочек рассмотрены различные моменты энергии и показана связь между энергетической и массовой динамикой. Для каждой механической системы показан закон сохранения энергии, при финитном возмущении и отсутствии внешних нагрузок, а также построены дисперсионные соотношения.

В качестве «опорной» модели использовался кристалл Гука. Для него показано сохранение потока и суперпотока энергии, которые являются  $k$ -ыми производными  $k$ -ого момента энергии. При этом энергетический центр возмущения движется равномерно, а энергетический радиус квадратично зависит от времени.

Рассмотрено усложнение кристалла Гука – цепочка с чередованием масс. Для нее подробно описано три различных вида первого момента энергии. Доказано, что в двух из них поток энергии не сохраняется, но при этом при симметричном относительно цепочки возмущении, например, удар по одной из частиц, поток энергии будет сохраняться, а энергетический центр не будет двигаться. Кроме этого доказано, что существует форма задания первого момента энергии, при котором поток полной энергии постоянная величина. Таким образом, существует такая неоднородная среда, в которой энергетический центр двигается с постоянной скоростью, как и в кристалле Гука.



Также для проверки сохранения потока энергии в цепочке с чередованием масс был проведен ряд численных экспериментов, в которых было отмечено, что положение энергетического центра линейно зависит от времени. Но также понятно, что из-за представления (2.25) сложно доверять численным экспериментам, потому что при достаточно гладком возмущении перемещения соседних частиц будут достаточно близки, а значит поток энергии будет величиной достаточно малой, что может оказаться, что поток энергии постоянен только из-за вычислительных ошибок.

Кроме того, рассмотрен кристалл на упругом основании. Для него выведены законы сохранения потока и суперпотока энергии. В данной системе, аналогично цепочке Гука, энергетический центр двигается с постоянной скоростью, а энергетический радиус есть параболическая функция времени.

В качестве дальнейшего развития данного исследования рассматривается изучение второго момента энергии для цепочки с чередованием масс и изучение цепочек с большим количеством частиц в ячейке периодичности. Также рассматривается использование более точных численных схем для моделирования таких систем и проверки выведенных законов сохранения.

**СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ**

1. Бабенков М.Б., Кривцов А.М., Цветков Д.В. Колебания энергий в одномерном гармоническом кристалле на упругом основании // Физ. Мезомех. – 2016. – Т. 19. – № 1. – С. 60–67;
2. Васильев Д.М. Кристаллография / Д.М. Васильев. – СПб.: Издательство СПбГПУ, 1996. – 474с.;
3. Косевич А.М. Основы механики кристаллической решетки. – М.: Наука, 1975;
4. Косевич А.М. Теория кристаллической решетки /А.М. Косевич. – Харьков: Выща шк., 1988;
5. Кривцов А. М. Теоретическая механика. Упругие свойства одноатомных и двухатомных кристаллов: учеб. пособие. – СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2009. – 126 с.;
6. Кривцов А.М. Морозов Н.Ф. О механических характеристиках наноразмерных объектов. – ФТТ. 2002 Т. 44. №12 с. 2158-2163;
7. Кривцов А.М. Колебания энергий в одномерном кристалле // ДАН. – 2014. – Т. 458. –№ 3 – С 279–281;
8. Кривцов А.М. Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой / А.М. Кривцов – М.: Физматлит, 2007. – 304с.;
9. Кузькин В.А., Кривцов А.М. Аналитическое описание переходных тепловых процессов в гармонических кристаллах // ФТТ, том 59, вып. 5, 2017, с. 1023-1035;
10. Кунин И.А. Теория упругих сред с микроструктурой. – М.: Наука, 1975. – 416 с.;
11. Лейбфрид Г. Микроскопическая теория механических и тепловых свойств кристаллов: пер. с нем. / Г. Лейбфрид. – М.: Физматлит, 1963.;
12. Chang C. W., Okawa D., Garcia H., Majumdar A., and A. Zettl «Breakdown of Fourier’s law in nanotube thermal conductors» Phys. Rev. Lett., vol. 101, p. 075903, Aug 2008;

13. Krivtsov A.M.: Dynamics of matter and energy. *Z Angew Math Mech.* e202100496 (2022);
14. Kuzkin V.A. Unsteady ballistic heat transport in harmonic crystals with polyatomic unit cell // *Continuum Mechanics and Thermodynamics* – 2019 – 31, pp. 1573–1599;
15. Lepri S. Thermal transport in low dimensions: from statistical physics to nanoscale heat transfer [Book]. - [s.l.]: Springer, 2016. - Vol. 921.;
16. Rieder Z., Lebowitz J. L., Lieb E. Properties of a harmonic crystal in a stationary nonequilibrium state // *Journal of Mathematical Physics.* – 1967. – T. 8. – №. 5. – C. 1073-1078;
17. Senga R., Komsa H.P., Liu Z., Hirose-Takai K., Krasheninnikov A.V., Suenaga K. Atomic structure and dynamic behaviour of truly one-dimensional ionic chains inside carbon nanotubes // *Nature Materials.* – 2014 – V. 13. – No. 11. – P. 1050–1054;