**АННОТАЦИЯ**

Тема: «Перераспределение энергии по пространственным направлениям в кристаллах»

Автор: Шварев Н.Г.

Научный руководитель: Кузькин В.А.

 Количественное описание неравновесных тепловых процессов в кристаллах–одна из актуальных проблем современной физики. Это связано со стремительным развитием нанотехнологий. В связи с этим большой интерес представляют процессы, происходящие в твердых телах при переходе к состоянию термодинамического равновесия. Неравновесное состояние может быть вызвано, к примеру, прохождением ударных волн или быстрым лазерным воздействием. Тогда кинетические энергии теплового движения атомов в разных направлениях могут значительно различаться. Это, в свою очередь, показывает, что кинетическая температура может проявлять тензорные свойства.

 Данная работа посвящена численному описанию перераспределения кинетической энергии по пространственным направлениям в негармонических кристаллах с треугольной кристаллической решеткой.

 В данной работе рассматриваются как одиночные реализации (расчет одного экземпляра программы), так и большое количество реализаций кристалла, различающихся только лишь случайными начальными условиями, с усреднением по сделанным реализациям. Это необходимо потому, что при описании тепловых процессов наибольший интерес представляют не случайные движения отдельных частиц, а изменение статистических характеристик. В данном случае в роли этой характеристики выступает кинетическая температура, за изменением которой и происходит наблюдение. Также в ходе работы рассматриваются разные размеры кристаллической решетки и влияние размера на результат.

 В работе было проведено моделирование перераспределения кинетической энергии по пространственным направлениям в негармонических кристаллах с треугольной кристаллической решеткой и показано следующее:

1) Рассмотрен процесс выравнивания температур, рассмотрено влияние количества частиц и влияние усреднения по реализациям на результаты, рассмотрена степень влияния нелинейности на поведение системы;

2)Экспериментально показано, что на малых временах порядка нескольких периодов осцилляции переходные тепловые процессы хорошо описываются гармонической моделью, однако на бо́льших временах добавляется новый процесс, связанный с нелинейностью;

3) Выведена формула подобия для различных амплитуд начальных скоростей и оценена область ее применимости;

4) Выделен медленный процесс, вызванный нелинейностью, и осуществлена попытка определить его форму, в результате которой было показано, что медленный процесс не описывается экспонентой, степенной функцией.

Ключевые слова: нанотехнологии, численное описание, кристалл.

ANNOTATION

Theme: "Redistribution of energy along spatial directions in crystals"

Author: Shvarev N.G.

Scientific adviser: Kuzkin V.A.

      Quantitative description of nonequilibrium thermal processes in crystals is one of the urgent problems of modern physics. This is due to the rapid development of nanotechnology. In this connection, the processes occurring in solids in the transition to the state of thermodynamic equilibrium are of great interest. A nonequilibrium state can be caused, for example, by the passage of shock waves or by fast laser action. Then the kinetic energies of the thermal motion of atoms in different directions can differ significantly. This, in turn, shows that the kinetic temperature can exhibit tensor properties.

     This paper is devoted to a numerical description of the redistribution of kinetic energy over spatial directions in nonharmonic crystals with a triangular crystal lattice.

     In this paper, we consider both single implementations (calculation of one program instance) and a large number of crystal realizations that differ only in random initial conditions, with averaging over the realized implementations. This is necessary because in the description of thermal processes, the most interesting are not random movements of individual particles, but a change in statistical characteristics. In this case, the role of this characteristic is the kinetic temperature, which is followed by observation. Also in the course of the work, different sizes of the crystal lattice and the effect of size on the result are considered.

   In the work, a simulation of the redistribution of the kinetic energy over spatial directions in nonharmonic crystals with a triangular crystal lattice was carried out and the following was shown:

1) Considered the process of temperature equalization, the influence of the number of particles and the effect of averaging over the realizations on the results, the degree of influence of nonlinearity on the behavior of the system is considered;

2) It has been shown experimentally that at short times on the order of several oscillation periods, transient thermal processes are well described by a harmonic model, but for a long time a new process associated with nonlinearity is added;

3) A similarity formula for various amplitudes of initial velocities is derived and the range of its applicability is estimated;

4) A slow process caused by nonlinearity is singled out, and an attempt was made to determine its shape, as a result of which it was shown that a slow process is not described by an exponential, power function.

Key words: nanotechnology, numerical description, crystal.