

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого»

На правах рукописи

Мурачёв Андрей Сергеевич

**Переходные тепловые процессы в одномерных
кристаллических решётках**

Специальность: 1.3.8. — физика конденсированного состояния

ДИССЕРТАЦИЯ
на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель
Чл.-корр. РАН., д.ф.-м.н., А.М. Кривцов

Санкт-Петербург — 2022

Оглавление

Введение	5
1 Модель одномерного кристалла	21
1.1 Введение	21
1.2 Математическая модель	23
1.3 Динамика частиц одномерного кристалла	26
1.4 Нецентрированные квадратичные величины	30
1.5 Корреляционный анализ	33
1.6 Центрированные квадратичные величины	36
1.7 Колебания энергий при мгновенном тепловом возмущении	40
2 Колебания кинетической температуры	43
2.1 Введение	43
2.2 Динамика ковариаций	44
2.3 Представление через функции Бесселя	46
2.4 Осцилляции кинетической температуры	52
2.4.1 Тепловое эхо	52
2.4.2 Реализации теплового эха	54
2.4.3 Асимптотики	59
2.4.4 Характеристики теплового эха	62
2.4.5 Пример	64
2.5 Заключение к главе 2	65

3	Переход к энергетическому равновесию при мгновенной нагрузке	68
3.1	Введение	68
3.2	Формулировка задачи	69
3.3	Кристалл в тепловом равновесии	71
3.3.1	Вириальное соотношение	71
3.3.2	До деформации	72
3.3.3	После деформации	73
3.4	Динамика переходного процесса	74
3.5	Пример	78
3.6	Заключение к главе 3	79
4	Диффузионные процессы	81
4.1	Введение	81
4.2	Дисперсии перемещений в бесконечном кристалле	84
4.3	Случай малых времён	88
4.4	Асимптотика для больших N	91
4.5	Сравнение средних по ансамблю и пространству	93
4.6	Заключение к главе 4	95
	Литература	97

Посвящаю моей маме и моим родственникам, которые все без исключения поддерживали меня на протяжении всего того времени, что я писал эту работу.

Введение

Бытует мнение, которое относится к точке зрения атомиста, что все уравнения в частных производных математической физики, которые описывают пространственные и временные изменения любых физических величин (температуры, деформации, напряженности поля и т. д.) в строго математическом смысле неверны...

Эрвин Шредингер

Актуальность

Одной из задач физики конденсированного состояния является теоретическое изучение физической природы свойств неорганических и органических соединений в зависимости от температуры. Для описания термомеханических свойств твёрдых тел используются, в основном, две концепции. Согласно первой концепции, тело представляет собой непрерывный континуум, микроструктурой которого можно пренебречь. Такое континуальное описание хорошо зарекомендовало себя при рассмотрении процессов, происходящих в телах на макро-масштабе. Согласно второй концепции тело представляет собой совокупность дискретных частиц, взаимодействие которых между друг другом определяет механические и тепловые характеристики твёрдого тела. Дискретное описание чаще всего используется для задач связанных с механикой микроскопических тел. Дискретное описание позволяет в деталях изучить переходные процессы в твёрдых телах.

В настоящей работе предметом исследования являются идеальные одномерные кристаллы — органические и неорганические соединения, такие как карбин [102], ионные кристаллы [100], молекулы белков [34, 91, 70, 118]. Сверхчистые кристаллы с одной стороны представляют из себя удобную математическую модель для дискретного описания вещества, во многих случаях допускающие аналитические решения, а с другой стороны, появившееся благодаря стремительному развитию нанотехнологий практически бездефектные, близкие к идеальным кристаллам, материалы демонстрируют уникальные характеристики переходных процессов. Дискретные модели вещества открывают новые возможности для описания процессов в кристаллах на наноуровне. Значительный вклад в развитие дискретных подходов в физике конденсированного состояния внесли работы Ф. Боннотто [11], С.Н. Гаврилова [29, 30], М.А. Гузева [38, 39], О.В. Гендельмана [31, 32], Р.В. Гольдштейна [36], И. Е. Головнёва [37], С.В. Дмитриева [19, 20, 98], А.М. Кривцова [64], В.А. Кузькина [80], З. Рейднера [96], С. Лепри [84], С. Чанга [15].

Одномерный случай, рассмотренный в данной работе, является хорошим приближением многих реальных систем. Подход к описанию тепловых и механических процессов, развиваемый в данной работе, может быть распространён на двумерные и трёхмерные кристаллы. Вероятно, что явления, аналогичные описанным в настоящей работе, можно обнаружить в многомерных кристаллах, но именно в одномерном случае их аналитическое описание является наиболее простым.

Таким образом, теоретическое исследование кристаллических веществ в твёрдом состоянии и изменения их физических свойств при различных внешних воздействиях является актуальной задачей физики конденсированного состояния чему и посвящена данная работа.

Обзор литературы

Представления об атомном строении вещества восходят к античности, к Демокриту (460–370 гг. до н.э.) [127]. Если смотреть из современной эпохи, идеи греческого философа были достаточно примитивными, однако, главная его идея была верна, а именно, что всё вещество состоит из атомов — неделимых кусочков материи, способных сцепляться друг с другом. Античные представления об атомарном строении вещества почти в неизменном виде просуществовали до начала XIX века — до тех пор, пока английский химик Джон Дальтон не нашёл экспериментальные свидетельства истинности атомной теории [56].

В XIX веке благодаря работам Фарадея, Резерфорда, Дж.Дж. Томпсона и др. было установлено, что электроны входят в состав атома, найдены заряд электрона, отношение заряда электрона к его массе, обнаружено явление радиоактивности. В 1903 году Резерфордом предложена планетарная модель атома. Дальнейшее развитие теория строения атома получила в новой науке — квантовой механике. Практически одновременно с атомной теорией возникла и теория термоупругости. По всей видимости, первая лекция по термоупругости была прочитана французским математиком Жан-Мари Дюамелем во Французской академии наук в Париже 23 февраля 1835 года и опубликована в *Journal de l'École Polytechnique* в 1837 году [23]. Этому событию предшествовали два важных события: в 1822 году была опубликована работа Фурье по теории тепла [27], а в 1827 году появилась статья об основаниях теории упругости [89]. Формулировка уравнений термоупругости принадлежит Ф. Нейману [90], Э. Альманси [3], О. Тедоне [110] и В. Фойгту [116].

Будем говорить о двух состояниях в котором могут находиться кристаллические тела — равновесном и неравновесном. В равновесном состоянии на рассматриваемых масштабах времени не происходит изменения во времени и пространстве никаких статистических характеристик тела, в неравновесном же состоянии, статистические характеристики тела существенно зависят от времени. Каждое состояние равновесия, в математическом смысле является асимп-

тотическим пределом по времени некоего неравновесного состояния, однако же кристалл из не всякого неравновесного состояния переходит в равновесие. Процессы сопровождающие эволюцию статистических характеристик тел к состоянию равновесия называются переходными процессами.

Неравновесные процессы в твёрдых телах на нано- и микромасштабе в настоящее время являются предметом интенсивных исследований, отчасти обусловленных развитием нанотехнологий [6, 36, 37, 53, 59, 66, 111]. Во многих аналитических и экспериментальных работах демонстрируется аномальный характер тепловых процессов в сверхчистых материалах [11, 15, 31, 38, 49, 84, 96]. Неравновесные процессы в наноматериалах могут быть инициированы ударными волнами [43, 45, 46, 57] или ультракороткими лазерными импульсами [51, 52, 92, 104].

Переход к равновесию в нелинейных системах обусловлен обменом энергией между колебательными модами решётки, что с течением времени приводит к равному распределению энергии по всем степеням свободы. В линейных системах колебательные моды не взаимодействуют но, тем не менее, происходит эволюция некоторых макроскопических параметров системы. На микромасштабе переход к равновесию в гармонических системах на больших временах сопровождается следующими термомеханическими процессами: функция распределения скоростей стремится принять гауссову форму (см. рис. 1) [21, 42, 75], полная энергия постепенно равно перераспределяется между кинетической и потенциальной [2, 5, 62, 75] согласно теореме о вириале [7, 47, 61, 72, 79], в системах с более чем одной степенью свободы происходит перераспределение кинетической энергии движения частиц по степеням свободы [126]. В гармонических бесконечных системах распределение кинетической энергии стремится стать пространственно однородным и неизменным во времени [42, 77, 108]. Эти факты позволяют применить понятие теплового равновесия к гармоническим системам. Макроскопическое описание переходного процесса также является сложной задачей, поскольку требует применения специальных определяющих

уравнений для сверхбыстрых атомных процессов. В настоящей работе развивается подход, описывающий термомеханические неравновесные процессы в материалах, учитывающий их дискретную структуру. Рассматриваются два типа процессов: тепловые и диффузионные. При этом тепловые характеристики тел ассоциируются со скоростями составляющих их частиц, а диффузионные процессы — с перемещениями частиц. Ввиду этого диффузионные и тепловые процессы тесно связаны друг с другом.

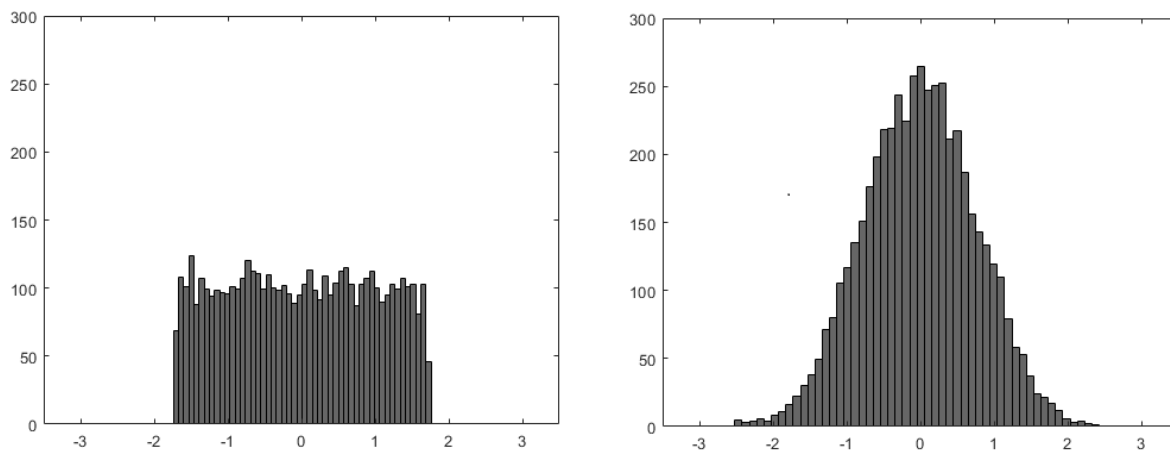


Рис. 1: Гистограммы скоростей гармонического кристалла при $t = 0$ (слева) и при $t = \frac{0.01N}{\omega_e}$ (справа), полученные численным моделированием. Количество частиц $N = 5000$, шаг по времени $dt = \frac{0.02}{\omega_e}$, ω_e — элементарная частота (определена ниже).

Кристаллы с простыми решётками являются предметом обширных исследований неравновесных процессов в твёрдых телах [58, 84, 96, 117, 118]. Из всех кристаллических систем одномерные гармонические кристаллы представляют собой наиболее простые и удобные для изучения системы, поскольку допускают аналитические решения и позволяют проверить фундаментальные явления, присущие также многомерным системам [5, 32, 39, 98, 101].

Недавние исследования показали, что протекание энергетических процессов в гармонических кристаллах существенно отличается от той картины, которую дает классическая термодинамика [18, 47, 96]. Во-первых, в силу линейности системы, высокочастотные тепловые и низкочастотные механические движения оказываются независимыми, что позволяет изучать энергетические процессы

отдельно, без возмущений, связанных с механическим движением. Во-вторых, распространение тепла носит баллистический, недиффузионный характер — фактически реализуется тепловая сверхпроводимость [14, 16, 64, 49, 93]. Возникающие тепловые волны нестационарны и характеризуются достаточно сложной динамикой [64].

Тепловые и деформационные процессы в кристаллических решётках изучаются численными и аналитическими методами. Термомеханическое моделирование материалов в неравновесных условиях было предметом тщательного изучения Т. В. Дудниковой [21, 22] Д. А. Индейцева [51], С. Н. Гаврилова [29, 30], М. А. Гузева [122], А. М. Кривцова [62, 64, 67] и других авторов.

Но ещё до того, как эти результаты стали известны, в 1914 году Шрёдингер опубликовал работу, в которой выводились уравнения динамики бесконечной цепочки частиц [103]. Уже в той работе Шрёдингер заметил, что вследствие перехода энергии колебаний от одной частицы к другой соседи каждой частицы производят на неё некий эффект диссипации, а колебания частиц описываются функциями Бесселя.

Среди специфических явлений неравновесных энергетических процессов в дискретных системах можно отметить высокочастотные колебания энергий. Теорема о вириале позволяет охарактеризовать энергетическое состояние гармонической системы одним параметром — кинетической температурой T :

$$k_B T = m \langle v_n^2 \rangle, \quad (1)$$

где k_B — константа Больцмана, m — масса частиц кристалла, v_n — скорости частиц. В некотором смысле таким образом определённая кинетическая температура близка к классической термодинамической температуре.

Обоснованию использования такого варианта определения температуры посвящено много работ. Эквивалентность в термодинамическом пределе предсказаний, полученных из различных статистических ансамблей (микроканонических, канонических и макроканонических), является широко признанным фактом [95]. Наблюдаемые термодинамические величины (в том числе и темпера-

тура) представляют собой результат усреднения значений соответствующих величин по всевозможным микросостояниям. В работе [97] получено общее строгое выражение для температуры микроканонического ансамбля, в частности из этого решения следует, что температура связана с геометрической структурой фазового пространства. Из более позднего обобщения работы [97] следует, что в состоянии равновесия несколько различных вариантов термодинамической температуры согласуются с кинетической температурой, как и ожидалось из принципа равномерного распределения [54].

В работе [35] уже другим методом, с использованием строгих методов дифференциальной геометрии, получены явные выражения для термодинамической и кинетической температуры, которые оказываются эквивалентны. В вышеупомянутых работах [35, 97] предполагается, что система обладает свойством эргодичности. Хотя гармоническая цепочка не является в строгом смысле эргодической, между тем, системы гармонических осцилляторов могут демонстрировать эргодическое поведение, когда рассматриваемая система становится достаточно большой. Например, кинетическая энергия такой системы не является эргодической величиной. Однако, оказывается, что отклонение от эргодичности обращается в нуль при увеличении длины цепочки. В регулярной гармонической решетке такое поведение демонстрируют некоторые функции, в том числе кинетическая и потенциальная энергии, а следовательно, кинетическая температура [112].

В. Хувер в работе [48] замечает, что хоть и существует достаточно много альтернативных определений температуры (кинетическая температура, конфигурационная, Ланжевена, локального термодинамического равновесия), в состоянии равновесия и только в состоянии равновесия все эти температуры одинаковы и в концепции температуры нет двусмысленности. Вдали от равновесия каждая из этих «температур» отличается от других. Между тем, помимо того, что выражение для кинетической температуры имеет более простой вид, чем

вышеобозначенные определения температуры, она пропорциональна одной из сохраняющихся величин: энергии.

Вдали от равновесия, особенно в численных экспериментах, кинетическую температуру удобно использовать как энергетическую характеристику системы (см. [55, 62, 109]). В более сложных случаях, не поддающиеся аналитическому описанию, используются классические определения температуры. Например, в работе [94] представлен метод определения температуры с использованием усредненных по времени измерений с помощью детектора с зарядовой связью. В работе представлена температурная зависимость для металлической пластинки в случае непрерывного лазерного нагрева. В работе исследуется высокотемпературный нагрев компактным лазерным лучом [106]. Определение характеристик нагрева мишени достигается путем комбинирования рентгеновской спектроскопии и измерения протонов, ускоренных от алюминиевой пластины. В [83] исследуется две разных модели для описания взаимодействия лазерного импульса с наночастицами в фемтосекундном, пикосекундном и наносекундном режимах, причём предполагается, что в любой момент времени решёточная и электронная температура равны друг другу.

Из представленного обзора видно, что существуют различные подходы к описанию тепловых переходных процессов в микро и наноструктурах. В настоящей работе, следуя походу Ливи [35], Кривцова [62] и Хувера [48] используется кинетическая температура. Такой подход позволяет в деталях изучить переходные процессы.

В статье Клейна и Пригожина [75], на основе решения полученного Шрёдингером [103], было показано, что в бесконечном одномерном гармоническом кристалле со случайными начальными условиями колебания кинетической и потенциальной энергий описываются функцией Бесселя первого рода и нулевого порядка и стремятся к равным друг другу равновесным значениям.

В более поздних работах А.М. Кривцова [62, 64, 80] тепловые процессы в одномерных кристаллах исследовались путем анализа уравнений динамики ко-

вариаций скоростей частиц (ковариацией называется математическое ожидание от произведения двух случайных величин). Ковариационный подход обобщает классические понятия кинетической и потенциальной энергий, путём введения обобщённых энергий, пропорциональных ковариациям скоростей частиц и ковариациям деформаций межчастичных связей [63].

В случае мгновенного теплового возмущения для простейшей модели одномерного гармонического кристалла формулы, описывающие колебания энергий, идентичны полученным Клейном и Пригожиным [75]. Наивное объяснение причины колебаний энергий состоит в том, что в каждый момент времени для системы, находящейся в неравновесном состоянии, кинетическая энергия отличается по значению от потенциальной, однако система стремится прийти в состояние в котором энергии равны. Инерционность этого процесса порождает колебания энергий. Обзор существующих решений, в основном полученных для установившейся теплопроводности, дан в работах [11, 17, 84]. Нестационарные режимы проводимости описаны в работах [33, 40].

Преимущество ковариационного подхода заключается в том, что он позволяет найти формулы для колебания энергий в более сложных системах, включая многомерные кристаллы [8, 77, 80, 81, 88, 105] и для кристаллических систем на упругой подложке [5].

В упомянутых выше работах наноразмерные тепловые процессы изучались отдельно от механических процессов. Достижения в современных технологиях привели к возможности реализации сверхбыстрых механических процессов, в которых скорость механической нагрузки сравнима или даже превышает скорость локального теплового равновесия в рассматриваемой системе. Это условие выполняется, если материал быстро нагружается силами, равномерно распределёнными по длине образца [87, 119]. Такие нагрузки возникают в наноразмерных электронных компонентах экспериментального оборудования, требующих быстрых переключателей магнитного поля, которые, например, необходимы в физике конденсированного состояния, физике плазмы или при генерации

пространственно изолированных магнитных полей [99]. Электрические импульсы могут создавать распределённые электромагнитные нагрузки на круговые образцы с частотой от единиц до нескольких десятков за наносекунду [119, 87]. В [69] была предложена идея сверхбыстрого фотоприемника, способного преобразовывать фемтосекундные световые импульсы в электрические импульсы такой же длины. В статье [99] демонстрируется полностью оптический метод для генерации импульсов магнитного поля порядка нескольких тесла длительностью в несколько десятков фемтосекунд. В ближайшем будущем ожидается, что длительность электромагнитных импульсов в экспериментах сократится до менее чем фемтосекунды. Фемтосекундные лазеры уже существуют [113], а аттосекундные лазеры находятся в стадии разработки [25, 74, 114]. Следовательно, аналитическое исследование влияния сверхбыстрых механических нагрузок на тепловые процессы необходимо, чтобы обеспечить теоретическую основу для предстоящих экспериментальных исследований.

Анализ взаимодействия механических и тепловых процессов требует учета нелинейности в межчастичном потенциале. Описание энергетических процессов в кристаллических структурах при малой нелинейности также может существенно опираться на результаты, полученные для гармонических систем [76]. Удобной моделью с квадратичным межчастичным потенциалом является одномерный α -ФПУ кристалл [10, 26, 28, 71]. Модель α -ФПУ кристалла позволяет учесть такие эффекты деформируемого твёрдого тела, как теплового расширение и переход механической энергии в тепловую. Впервые, данная модель цепочки исследовалась в новаторской работе Ферми, Паста, Улама и Цингу [26]. В результате численных экспериментов были обнаружены немонотонно затухающие механические колебания, инициированные в начальный момент времени: затухание и рост энергии колебаний чередовались. Этот эффект в литературе получил название «Парадокса Ферми-Паста-Улама-Цингу» [28].

Работа организована следующим образом. В главе 1 дано описание модели одномерного кристалла, приводятся основные результаты ковариационного ана-

лиза. Получены детерминированные дифференциальные уравнения для статистических величин. Основные результаты этой главы опубликованы в работах А.М. Кривцова [62, 64]. Результаты данной главы не выносятся на защиту.

В главе 2 исследуются тепловые процессы в *конечных* кристаллах. Именно рассмотрением конечных систем, это исследование отличается от предыдущих работ [5, 62, 64], где основное внимание уделяется бесконечным кристаллам. Показано, что для конечных кристаллов амплитуда колебаний кинетической температуры уменьшается только до определенного момента времени, после чего наблюдаются её периодически повторяющиеся всплески. Это явление можно интерпретировать как тепловое эхо. В главе 2 получены точные и асимптотические формулы, описывающие колебания кинетической энергии. Эти результаты, в частности, важны для описания аномального распространения тепла в сверхчистых материалах [18, 64, 84]. Основные результаты, полученные в главе, опубликованы в [88].

В главе 3 рассматривается модель одномерного α -ФПУ кристалла, подвергнутого мгновенной деформации. Мгновенное деформирование кристалла инициирует переходный процесс, в результате которого часть механической энергии нагружения переходит в тепловую энергию хаотического движения атомов. С использованием подхода анализа ковариаций [62] показано, что колебания энергии в инициированном переходном процессе описываются функцией Бесселя. Основные результаты, полученные в главе, опубликованы в [73].

В главе 4 анализируются диффузионные процессы в гармонических кристаллах, сопутствующие энергетическим процессам. Хотя в кристалле и не происходит изменения порядка частиц, частицы могут далеко уходить от своего начального положения, создавая существенные деформации межчастичных связей. Диффузионные процессы в кристалле сложны и существенно отличаются от энергетических процессов. Тепловые процессы в кристаллах могут быть разделены на быстрые и медленные, первые из которых связаны с перераспределением энергии в кристалле, а вторые с переносом энергии [78]. В главе 4

показано, что диффузионные процессы также могут быть также разделены на быстрые и медленные, имеющие, однако, другой физический смысл. Основные результаты, полученные в главе, опубликованы в [121].

Методы исследований

Проведённое в данной работе исследование динамики статистических характеристик одномерного кристалла основано на методе анализа ковариаций. Уравнения динамики кристалла и статистических характеристик решаются с помощью дискретного преобразования Фурье. Полученные аналитические решения исследуются с помощью анализа асимптотик. Для численного решения задач используются численные методы решения дифференциальных уравнений.

Цель работы

Целью работы является получение аналитических выражений, описывающих переходные процессы, инициированные мгновенным тепловым возмущением в конечных одномерных гармонических кристаллах, а также переходный процесс, инициированный мгновенной деформацией, в бесконечных одномерных слабоангармонических кристаллах.

Личный вклад

Аналитическое описание явления теплового эха получено лично автором. Комплекс программ для подтверждения всех аналитических результатов данной работы разработан лично автором. Все численные эксперименты, результаты которых представлены в диссертации, подготовлены и проведены лично автором. Постановка задач и анализ полученных результатов проводились совместно с научным руководителем. Основные положения и выводы диссертационной работы сформулированы автором.

Основные положения и результаты, выносимые на защиту

1. Выражение, описывающие эволюцию кинетической температуры во времени после начального теплового возмущения в одномерном конечном гармоническом кристалле, полученное методом анализа динамики ковариаций. Полученное выражение позволяет предсказывает существование нового явления теплового эха — периодического кратковременного повышения амплитуды колебаний кинетической температуры.
2. Выражение, описывающие эволюцию кинетической температуры во времени в переходном процессе, инициированном мгновенной однородной деформацией, в одномерном бесконечном кристалле с нелинейным межчастичным потенциалом, полученное методом анализа динамики ковариаций. Из данного выражения следует, что рассматриваемый переходный процесс имеет колебательный характер и приближённо описывается функцией Бесселя первого рода.
3. Выражение для дисперсии перемещений в переходном процессе, инициированном начальным тепловым возмущением, в одномерном конечном гармоническом кристалле, полученное методом анализа динамики ковариаций. Анализ полученного выражения демонстрирует, что дисперсия перемещений подчиняется параболическому закону, причём её максимальное значение пропорционально количеству частиц в кристалле.

Научная новизна

Научная новизна представленной работы определяется следующими результатами, полученными впервые:

1. Развита подход к описанию тепловых характеристик конечных гармонических одномерных кристаллов. Получено выражение, описывающие эволюцию кинетической температуры во времени после начального теплового

возмущения, приводящие к реализации явления теплового эха — периодического кратковременного повышения амплитуды колебаний кинетической температуры.

2. Аналитически получены выражения, описывающие протекание переходных процессов в одномерных системах. Для переходного процесса, инициированного мгновенной однородной деформацией в одномерном кристалле с нелинейным межчастичным потенциалом, получено выражение для кинетической температуры кристалла. Показано, что переходный процесс имеет колебательный характер и приближённо описывается функцией Бесселя первого рода.
3. Разработан метод описания диффузионных характеристик в конечном гармоническом одномерном кристалле. Получены выражения для дисперсии перемещений в переходном процессе, инициированном начальным тепловым возмущением. Аналитически демонстрируется, что дисперсия перемещений подчиняется параболическому закону, причём её максимальное значение пропорционально количеству частиц в кристалле.

Достоверность полученных результатов

Достоверность полученных результатов достигается путем использования апробированных физических моделей, сравнением с данными численного эксперимента, применением современных методов и известных методик моделирования.

Практическая значимость работы

Результаты данной работы могут быть использованы для описания термомеханических процессов в одномерных бездефектных кристаллах при относительно невысоких температурах, когда эффекты ангармоничности межатомных взаимодействий малы. Например, показано, что в одномерном кристалле углерода, подверженном мгновенному тепловому удару до значения температуры 100К,

эффект теплового эха может приводить к скачку температуры примерно на 5К; однородная деформация одномерного кристалла углерода на 1,0% от равновесного межатомного расстояния может приводить к изменению температуры на 1,7К. Сравнение полученных результатов с экспериментальными данными позволит определить применимость использованных моделей для описания реальных систем. Результаты могут быть обобщены для двумерных и трёхмерных случаев, а также на случаи слабой нелинейности.

Апробация работы

Результаты работы докладывались на семинарах Института проблем машиноведения РАН (г. Санкт-Петербург), кафедры Теоретическая механика СПбПУ, на всероссийских и международных конференциях: Advanced Problems in Mechanics (г. Санкт-Петербург, 2016, 2017, 2018, 2019, 2020), научном семинаре Института проблем сверхпластичности металлов РАН (г. Уфа), научном семинаре институт химической физики им. Н.Н. Семенова РАН (г. Москва), научном семинаре кафедры физики конденсированного состояния Челябинского государственного университета (г. Челябинск).

Исследования автора на различных этапах работы поддерживались: Министерством образования и науки Российской Федерации в рамках грантов № 18-11-00201 (глава 2), № 19-41-04106 (глава 3), № 16-29-15121 (глава 4), программы Научного центра мирового уровня по направлению «Передовые цифровые технологии» СПбПУ, соглашение от 17.11.2020 № 075-15-2020-934 (глава 4).

Структура и объем работы

Работа состоит из введения, четырёх глав. Работа содержит 1078 страниц, 10 рисунков, список литературы содержит 127 наименований.

Публикации по теме исследования

а) Публикации в изданиях, входящих в перечень ВАК:

1. Кривцов А. М., Мурачѳв А. С., Цветков Д. В. Нестационарные термодиффузионные процессы в конечном одномерном кристалле. // 2017. Чебышевский Сборник. Т. 18. № 3.
2. Murachev A.S., Krivtsov A.M., Tsvetkov D.V. Thermal echo in a finite one-dimensional harmonic crystal. // 2018. Journal of Physics: Condensed Matter. Vol. 31. № 9. P. 095702.
3. Krivtsov A. M., Murachev A. S. Transition to thermal equilibrium in a crystal subjected to instantaneous deformation. // 2021. Journal of Physics: Condensed Matter. Vol. 33. № 21. P. 215403.
4. Krivtsov A.M., Murachev A.S., Tsvetkov D.V. Transient diffusion and thermal processes in a finite one-dimensional harmonic crystal. // 2022. Journal of Physics: Condensed Matter. Vol. 34 P. № 4. P. 095401

Глава 1

Модель одномерного кристалла

Математика, если взглянуть на нее с правильной точки зрения, обладает не только истиной, но и совершенной красотой – красотой холодной и суровой, как красота скульптуры, не потекающей нашим слабостям, лишенной роскошных приманок живописи или музыки, и все же безукоризненно чистой и способной на строгое совершенство, доступное лишь величайшему искусству

Бертран Рассел

1.1 Введение

Большинство существующих моделей твёрдых тел можно разделить на два класса: те, в которых считается, что вещество представляет собой непрерывный континуум, и те, которые основываются на дискретных представлениях о структуре вещества. Как часто оказывается в физике, это разделение носит исторический характер, и не потеряло свою актуальность из-за того, что явления на разных масштабных уровнях удобно описывать разными моделями. Для человека, не вооружённого специальными приборами, дискретная природа вещества практически необнаружима напрямую из опыта. Тщательное наблюдение за миром даёт лишь подсказки для того, чтобы сделать вывод об атомарной структуре материи. Математический аппарат, который использует-

ся для описания напряженно-деформируемых состояний материи оказывается чрезвычайно эффективным для решения большого класса задач [125]. Однако, континуальный подход не может быть эффективен на всех масштабах, так как математический символ производной означает предельный переход при приращении пространства, стремящееся к нулю. В этот момент обычно делается оговорка, что в континуальной теории в качестве структурных элементов рассматриваются «физически бесконечно малые» объёмы — то есть объёмы, с одной стороны достаточно малые, для того, чтобы пренебречь изменением на них дифференцируемого параметра, а с другой стороны достаточно большие, чтобы содержать огромное число атомов. Шрёдингер в одной из своих работ [103] замечает, что в этом случае, цель атомиста заключается в поиске и предсказания условий, при которых дифференциальные уравнения, выведенные из континуальных представлений, приводят к ощутимо неверным результатам в силу реально существующей атомной структуры вещества. На этом пути наиболее значимые и на тот момент, единственные успехи принадлежали кинетической теории газа. Сегодня, мы можем говорить, что к этому списку добавилась физика наноматериалов.

При описании чисто упругого деформирования противоречия между дискретным и континуальным описанием кажутся не столь существенны и в принципе преодолимы. Противоречия оказываются более существенными и трудно разрешимыми при описании неупругого деформирования и разрушения материала [124]. Ещё один пример, где дискретное и континуальное описания дают существенно различные ответы — это описание тепловых процессов в кристаллических решётках. В теории термоупругости температура вводится, как параметр, изменению которого, сопутствуют возникновение макроскопических деформаций и напряжений [125]. Из этого становится понятно, что высокочастотное описание колебаний кинетической температуры в переходном процессе в рамках теории термоупругости оказывается трудноосуществимо. Однако, колебания энергии можно получить из решения уравнений движения

частиц кристаллического материала [75], а также из ковариационного анализа [62]. Последний метод позволяет обобщить результаты на более сложные случаи [80, 88, 8, 81].

Одномерный кристалл — самая простая модель материала с кристаллической структурой. Настоящая глава посвящена математическому описанию модели одномерного кристалла. Подход к описанию статистических характеристик кристалла, излагаемый ниже, основан на работах [62, 64], он позволяет получить динамические уравнения для статистических характеристик кристалла. Аналитическое решение этих уравнений описывает тепловые и диффузионные процессы в кристалле. Рассматриваемый кристалл представляет собой стохастическую систему. Такое поведение определяется случайными начальными условиями — такими условиями, при которых в начальный момент времени перемещения и/или скорости частиц представляют собой случайные величины. Для анализа динамики статистических характеристик кристалла, таких как кинетическая температура и дисперсия перемещений используется анализ ковариаций.

В работе рассматриваются одномерные кристаллы, однако предлагаемые методы могут быть распространены на двух- и трехмерные системы. Уравнения и соотношения, полученные в этой главе используются в следующих главах при выводе уравнений, описывающих термомеханические процессы в одномерных кристаллах, выведенных из стационарного состояния.

1.2 Математическая модель

Механическая система, которую мы рассматриваем представляет из себя следующее: на прямой оси x расположены счетное множество точечных частиц с одинаковой массой m , которые нумеруются индексами $0, 1, 2, 3 \dots N$, причём N может быть как натуральным числом так и бесконечно большим. Две частицы, которые имеют соседние индексы будем называть соседями, в частности, частица с большим номером — правый сосед. Две соседние частицы должны

оказывать друг на друга силу, величина которой зависит только от расстояния между частицами. Сила между n -й и $n + 1$ -й частицей исчезает, если последняя находится на равновесном расстоянии $+a$ от первой вдоль оси системы. Если это расстояние равно $a + u$, то в $n + 1$ -я частица должна испытать силу $-Cu$ от n -й и оказать на нее силу $+Cu$, где C является константой (параметром системы), а величину u в дальнейшем мы будем называть «перемещением» соответствующей частицы. Вообще говоря, сила между частицами может зависеть произвольным образом от перемещения. В том случае, когда эта зависимость линейная, будем называть систему «гармоническим» кристаллом. Такое приближение допустимо, в том случае, если температура кристалла далека от температур плавления. Более сложный случай нелинейного межчастичного взаимодействия рассмотрен в главе 3, в настоящей же главе рассмотрение ограничивается лишь линейными системами. Константу C будем называть «жёсткостью» или «жёсткостью первого порядка» поскольку её физический смысл состоит в жёсткости линейной пружинки, соединяющей соседние частицы.

Положение равновесия системы заключается в следующем: частица с индексом 0 лежит в начале координат, частицы с индексами 1, 2, 3... лежат в точках с координатами $a, 2a, 3a...$ соответственно. Мы предполагаем, что величины C, a , а также расстояния между соседними частицами в начальный момент времени принадлежат множеству вещественных чисел, чтобы гарантировать, что на частицу никогда не действуют бесконечные силы. Теперь, когда механическая система полностью определена требуется описать её динамику, а также динамику её статистических характеристик.

Пусть $u_0, u_1, u_2...$ — перемещения частиц с соответствующими индексами 0, 1, 2... в некоторый момент времени t , а $\varepsilon_{\frac{1}{2}}, \varepsilon_{\frac{3}{2}}, \varepsilon_{\frac{5}{2}}, \dots$ — деформации связей между соответствующими частицами:

$$\varepsilon_n = u_{n+\frac{1}{2}} - u_{n-\frac{1}{2}}. \quad (1.1)$$

Заметим, что деформации определённые в формуле (1.1) имеют размерность длины, и для того, чтобы привести их к привычным для механики безразмер-

ным деформациям, необходимо разделить их на константу a . В дальнейшем речь будет идти только об абсолютных деформациях ε_n . В этом случае уравнение движения системы имеет вид:

$$m\dot{v}_n = C\varepsilon_{n+\frac{1}{2}} - C\varepsilon_{n-\frac{1}{2}}, \quad \varepsilon_n \stackrel{\text{def}}{=} u_{n+\frac{1}{2}} - u_{n-\frac{1}{2}} \quad (1.2)$$

где ε_n — деформация связи между частицами $n+1$ и n , v_n — скорость частицы n , а точка означает дифференцирование по времени. С математической точки зрения, множество уравнений (1.2) для всех n представляет собой систему, в общем случае, бесконечную, обыкновенных дифференциальных уравнений. Для дальнейшего анализа предположим, что этому уравнению соответствуют периодические граничные условия (так называемые условия Борна-Кармана [120, 60]):

$$u_0 = u_N, \quad u_{N+1} = u_1 \quad (1.3)$$

или в терминах деформаций:

$$\varepsilon_i = \varepsilon_{N+i} \quad (1.4)$$

где N — произвольное натуральное число. Условия (1.4) можно интерпретировать так, что одномерный кристалл замкнут в кольцо, причём неявно предполагается, что радиус кольца достаточно велик для того, чтобы деформации связей, вызванные кривизной кольца, не оказывали существенного влияния на динамику частиц системы. Перепишем уравнение (1.2) и введём линейный разностный оператор \mathcal{L} :

$$\dot{v}_n = \mathcal{L}\varepsilon_n \stackrel{\text{def}}{=} \omega_e^2(\varepsilon_{n+\frac{1}{2}} - \varepsilon_{n-\frac{1}{2}}) \quad (1.5)$$

где $\omega_e \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{C/m}$ — элементарная частота. Заметим, что предельный переход $a \rightarrow 0$ при конечных m/a и Ca позволяет получить уравнение динамики натянутой струны или упругого стержня. В следующей главе получаются известные [103, 75] уравнения, описывающие динамику частиц, рассматриваемого кристалла.

1.3 Динамика частиц одномерного кристалла

Зададимся целью описать динамику частиц кристалла. Перепишем уравнение (1.5) и условие периодичности (1.4) в терминах перемещений u_n для того, чтобы перейти к дифференциальному уравнению динамики частиц от одной переменной:

$$\begin{aligned} \ddot{u}_n &= \mathcal{L}u_n \stackrel{\text{def}}{=} \omega_e^2(u_{n-1} - 2u_n + u_{n+1}), \\ u_0 &= u_N, \quad u_{N+1} = u_1, \end{aligned} \quad (1.6)$$

где введён линейный разностный оператор \mathcal{L} . Будем рассматривать начальные условия, соответствующие тепловому удару по находящемуся в покое кристаллу. Такие начальные условия могут быть вызваны, например, ультракоротким лазерным облучением, или прохождением через кристалл ударной волны.

$$t = 0 : \quad u_n = 0, \quad \dot{u}_n = \sigma \rho_n, \quad (1.7)$$

где ρ_n — случайные величины, σ — дисперсия начальных скоростей частиц. Для случайных величин ρ_n выполняется:

$$\rho_{n+N} = \rho_n, \quad \langle \rho_n \rangle = 0, \quad \langle \rho_k \rho_{k+n} \rangle = \delta_k^N, \quad (1.8)$$

где угловые скобки обозначают математическое ожидание, $\delta_n^N = 1$ при n кратном N и $\delta_n^N = 0$ в остальных случаях. Формулы (1.8) говорят о том, что случайные величины периодичны по n , имеют нулевое математическое ожидание и единичную дисперсию, а также они независимы при различии индексов менее, чем на N (иными словами, имеется N независимых случайных величин). В силу линейности системы (1.6), перемещения и скорости имеют нулевое математическое ожидание:

$$t = 0 : \quad \langle u_n \rangle = 0, \quad \langle v_n \rangle = 0. \quad (1.9)$$

Найдём решение начальной задачи (1.6)-(1.7). Для этого применим дискретное преобразование Фурье к дифференциальному уравнению (1.6) и введём новые переменные u_k^* :

$$\mathcal{F}u_n \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{n=0}^{N-1} u_n e^{\frac{-2\pi i k n}{N}} \stackrel{\text{def}}{=} u_k^*, \quad (1.10)$$

где введён оператор преобразования Фурье \mathcal{F} . Последовательно применим преобразование Фурье к \ddot{u}_n , u_{n-1} и u_{n+1} . Преобразование Фурье сохраняет степень дифференцирования:

$$\mathcal{F}\ddot{u}_n = \sum_{n=0}^{N-1} \ddot{u}_n e^{\frac{-2\pi i k n}{N}} \stackrel{\text{def}}{=} \ddot{u}_k^* \quad (1.11)$$

но требует умножения новой переменной u_k^* на комплексную экспоненту для переменной со смещённым индексом:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}u_{n-1} &= \sum_{n=0}^{N-1} u_{n-1} e^{\frac{-2\pi i k n}{N}} = \sum_{n=0}^{N-1} u_{n-1} e^{\frac{-2\pi i k (n-1)}{N} + \frac{-2\pi i k}{N}} = \\ &= \sum_{s=-1}^{N-2} u_s e^{\frac{-2\pi i k s}{N} + \frac{-2\pi i k}{N}} = \sum_{s=0}^{N-1} u_s e^{\frac{-2\pi i k s}{N}} e^{\frac{-2\pi i k}{N}} = u_k^* e^{\frac{-2\pi i k}{N}}, \end{aligned} \quad (1.12)$$

При выводе формулы (1.12) произведена замена переменной суммирования $s = n - 1$ и использовалось свойство периодичности системы $u_{-1} = u_{N-1}$. Аналогичные получим преобразование Фурье для u_{n+1} .

$$\begin{aligned} \mathcal{F}u_{n+1} &= \sum_{n=0}^{N-1} u_{n+1} e^{\frac{-2\pi i k n}{N}} = \sum_{n=0}^{N-1} u_{n+1} e^{\frac{-2\pi i k (n+1)}{N} - \frac{-2\pi i k}{N}} = \\ &= \sum_{s=1}^N u_s e^{\frac{-2\pi i k s}{N} - \frac{-2\pi i k}{N}} = \sum_{s=0}^{N-1} u_s e^{\frac{-2\pi i k s}{N}} e^{\frac{2\pi i k}{N}} = u_k^* e^{\frac{2\pi i k}{N}}. \end{aligned} \quad (1.13)$$

Таким образом, преобразование Фурье над уравнением (1.6) приводит к уравнению:

$$\ddot{u}_k^* - \omega_e^2 u_k^* (e^{\frac{-2\pi i k}{N}} - 2 + e^{\frac{-2\pi i k}{N}}) = 0. \quad (1.14)$$

Применим формулу

$$\cos(x) = \frac{e^{ix} + e^{-ix}}{2} \quad (1.15)$$

к правой части уравнения (1.14):

$$e^{\frac{-2\pi i k}{N}} + e^{\frac{-2\pi i k}{N}} - 2 = 2 \cos \frac{2\pi k}{N} - 2 = 2 \left(\cos \frac{2\pi k}{N} - 1 \right) = -4 \sin^2 \frac{\pi k}{N}, \quad (1.16)$$

где использовалась следующее соотношение:

$$\cos(2x) = 1 - 2 \sin^2(x). \quad (1.17)$$

После Фурье-преобразование уравнения динамики кристалла, получаем следующее дифференциальное уравнение:

$$\begin{aligned} \ddot{u}_k^* + L^* u_k^* &= 0, & L^* &= 4\omega_e^2 \sin^2 \frac{\pi k}{N} \\ u_0^* &= u_N^*, & u_{N+1}^* &= u_1^*, \end{aligned} \quad (1.18)$$

Будем искать решение уравнения (1.18) в виде:

$$u_k^* = A_k \cos(\sqrt{L}t) + B_k \sin(\sqrt{L}t), \quad (1.19)$$

где A_k и B_k — произвольные константы, определяемые из начальных условий.

Применим преобразование Фурье к начальным условиям (1.7):

$$t = 0: \quad \mathcal{F}u_n = u_k^* = 0, \quad \mathcal{F}\dot{u}_n = \dot{u}_k^* = \sigma \sum_{n=0}^{N-1} \rho_n e^{\frac{-2\pi i k n}{N}}, \quad (1.20)$$

и отсюда для констант A_k и B_k найдём:

$$A_k = 0, \quad B_k = \frac{\sigma \sum_{n=0}^{N-1} \rho_n e^{\frac{-2\pi i k n}{N}}}{\sqrt{L}}. \quad (1.21)$$

Чтобы получить истинные перемещения частиц применим обратное преобразование Фурье

$$u_n = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} u_k^* e^{\frac{2\pi i k n}{N}} \quad (1.22)$$

к выражению (1.19) с подставленными значениями констант (1.21):

$$u_n = \frac{\sigma}{2N\omega_e} \sum_{k=0}^{N-1} \frac{1}{\sin \frac{\pi k}{N}} \sin\left(2\omega_e t \sin \frac{\pi k}{N}\right) e^{\frac{2i\pi k n}{N}} \sum_{s=0}^{N-1} \rho_s e^{-\frac{2i\pi k s}{N}}. \quad (1.23)$$

после выделения вещественной части (1.23) приходим к формуле для перемещений частиц:

$$u_n = \frac{\sigma}{2N\omega_e} \sum_{k=0}^{N-1} \frac{1}{\sin \frac{\pi k}{N}} \sin\left(2\omega_e t \sin \frac{\pi k}{N}\right) \sum_{s=0}^{N-1} \rho_s \cos \frac{2\pi k(n-s)}{N}. \quad (1.24)$$

Заметим, что при $k = 0$ в выражении (1.24) особенности не возникает, и значение находится с использованием формулы для первого замечательного предела:

$$\left. \frac{\sin\left(2\omega_e t \sin \frac{\pi k}{N}\right)}{\sin \frac{\pi k}{N}} \right|_{k=0} = 2\omega_e t, \quad (1.25)$$

что позволяет переписать выражение (1.24) в следующем виде:

$$u_n = \frac{\sigma}{N}t + \frac{\sigma}{2N\omega_e} \sum_{k=1}^{N-1} \frac{1}{\sin \frac{\pi k}{N}} \sin \left(2\omega_e t \sin \frac{\pi k}{N} \right) \sum_{s=0}^{N-1} \rho_s \cos \frac{2\pi k(n-s)}{N}. \quad (1.26)$$

Выражение для деформаций получаем, подставляя (1.24) в (1.1):

$$\begin{aligned} \varepsilon_{n+\frac{1}{2}} = u_{n+1} - u_n = & \\ \frac{\sigma}{2N\omega_e} \sum_{k=0}^{N-1} \frac{1}{\sin \frac{\pi k}{N}} \sin \left(2\omega_e t \sin \frac{\pi k}{N} \right) \sum_{s=0}^{N-1} \rho_s \left(\cos \frac{2\pi k(n+1-s)}{N} - \cos \frac{2\pi k(n-s)}{N} \right) = & \\ - \frac{\sigma}{N\omega_e} \sum_{k=0}^{N-1} \sin \left(2\omega_e t \sin \frac{\pi k}{N} \right) \sum_{s=0}^{N-1} \rho_s \left(\sin \frac{2\pi k(n-s+1/2)}{N} \right), & \end{aligned} \quad (1.27)$$

и дифференцируя (1.24) находим формулу для амплитуды скорости n -ой частицы:

$$v_n = \frac{\sigma}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \cos \left(2\omega_e t \sin \frac{\pi k}{N} \right) \sum_{s=0}^{N-1} \rho_s \cos \frac{2\pi k(n-s)}{N}. \quad (1.28)$$

Рассмотрим частный случай, при котором из равновесия в начальный момент времени выведена только одна частица. Без умаления общности будем считать, что ее индекс $n = 0$, а скорость при $t = 0$ равна v^0 , тогда зависимости её перемещения, деформации связей (слева и справа) и скорости от времени суть:

$$u_0 = \frac{v^0}{2N\omega_e} \sum_{k=0}^{N-1} \frac{1}{\sin \frac{\pi k}{N}} \sin \left(2\omega_e t \sin \frac{\pi k}{N} \right), \quad (1.29)$$

$$\varepsilon_{\pm\frac{1}{2}} = -\frac{v^0}{N\omega_e} \sum_{k=0}^{N-1} \sin \frac{\pi k}{N} \sin \left(2\omega_e t \sin \frac{\pi k}{N} \right), \quad (1.30)$$

$$v_0 = \frac{v^0}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \cos \left(2\omega_e t \sin \frac{\pi k}{N} \right). \quad (1.31)$$

Таким образом мы получили основные характеристики динамики одномерного кристалла. Однако, эти величины зависят от скорости и перемещения центра масс. При рассмотрении физических систем удобно переходить в систему отсчёта связанную с самой системой, не учитывая перемещение и скорость системы,

как целого. Определение одних статистических характеристик кристалла, таких как кинетическая температура, через центрированные величины необходимо для того, чтобы исключить их зависимость от скорости системы. При определении других характеристик, таких как, дисперсия перемещений, необходимости в рассмотрении только центрированных величин нет. В следующем разделе даются формулы для центрированных квадратичных величин, которые в дальнейшем и будут использоваться для анализа колебаний энергий и диффузионных процессов.

1.4 Нецентрированные квадратичные величины

Введём средние по пространству значения перемещений и скоростей частиц:

$$\bar{u} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N u_n, \quad \bar{v} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N v_n. \quad (1.32)$$

Здесь и далее черта сверху означает среднее по пространству. Величины (1.32) не зависят от n и представляют собой перемещение и скорость центра масс системы. Для конечных N эти величины, в отличие от математического ожиданий (1.9) являются случайными и, вообще говоря, ненулевыми. Только при $N \rightarrow \infty$ величины (1.32) стремятся к нулю. В этом состоит существенное отличие конечного и бесконечного кристаллов. Введём центрированные перемещения и скорости

$$\tilde{u}_n \stackrel{\text{def}}{=} u_n - \bar{u}, \quad \tilde{v}_n \stackrel{\text{def}}{=} v_n - \bar{v}. \quad (1.33)$$

Центрированные величины \tilde{u}_n и \tilde{v}_n , в отличие от нецентрированных u_n и v_n , являются материально-объективными: они не меняются при смещении центра масс системы. В настоящей работе анализируются нестационарные тепловые и диффузионные процессы, причём под энергетическими процессами понимаются те, которые связаны со квадратом случайных центрированных скоростей частиц, а под диффузионными те, которые связаны со квадратом случайных центрированными перемещениями частиц.

Введём квадратичные переменные:

$$\xi_{pq} = \mathcal{M}(u_p u_q), \quad \kappa_{pq} = \mathcal{M}(v_p v_q), \quad \nu_{pq} = \mathcal{M}(u_p v_q), \quad (1.34)$$

где \mathcal{M} — некий линейный оператор, родственнй осреднению. Переменные ξ_{pq} будем называть диффузионными, κ_{pq} — тепловыми, а ν_{pq} — смешанными. Заметим также, что оператор осреднения \mathcal{M} (1.34) действует на нейцентрированные величины, в том случае, если рассматриваются центрированные величины, квадратичные переменные будем обозначать соответственно: $\tilde{\xi}_{p,q}$, $\tilde{\kappa}_{p,q}$, $\tilde{\nu}_{p,q}$. В частности, оператор \mathcal{M} может быть представлен в одном из следующих видов:

$$\begin{aligned} \mathcal{M}(\mathcal{S}_{pq}) &= \langle \mathcal{S}_{pq} \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \lim_{I \rightarrow \infty} \frac{1}{I} \sum_{i=1}^I \mathcal{S}_{pq}^i && \text{— математическое ожидание,} \\ \mathcal{M}(\mathcal{S}_{pq}) &= \{ \mathcal{S}_{pq} \} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \mathcal{S}_{p+k, q+k} && \text{— среднее по пространству,} \\ \mathcal{M}(\mathcal{S}_{pq}) &= \frac{1}{T} \int_0^T \mathcal{S}_{pq}(t) dt && \text{— среднее по времени,} \end{aligned} \quad (1.35)$$

где i — номер случайной реализации, T — интервал временного осреднения. Под случайными реализациями понимаются такие системы, все физические и статистические характеристики которых, в начальный момент времени идентичны друг другу. Заметим, что среднее по пространству имеет смысл лишь для систем с периодическими граничными условиями, тогда как для фиксированных и свободных граничных условий посчитать его без дополнительных предположений невозможно, осреднение по времени неудобно тем, что не позволяет получить уравнения для эволюции системы во времени. В настоящей работе будем определять квадратичные переменные, как ковариации соответствующих величин. Согласно постановке задачи (1.6)-(1.8) ковариации квадратичных переменных совпадают с математическим ожиданием произведения случайных величин:

$$\begin{aligned} \xi_{pq} &= \langle (u_p - \langle u_p \rangle)(u_q - \langle u_q \rangle) \rangle = \langle u_p u_q \rangle, \\ \kappa_{pq} &= \dots = \langle v_p v_q \rangle, \quad \nu_{pq} = \dots = \langle u_p v_q \rangle. \end{aligned} \quad (1.36)$$

В частности, одной из важнейших энергетических характеристик одномерного кристалла является кинетическая температура:

$$k_B T \stackrel{\text{def}}{=} m \langle \tilde{v}_p^2 \rangle, \quad (1.37)$$

где k_B — постоянная Больцмана. Заметим, что в формуле (1.37) используются центрированная скорость \tilde{v}_p . Преимущество рассмотрения кинетической температуры (1.37) состоит в том, что её значение может быть определено даже в состояниях, далёких от равновесия, тогда как термодинамическая температура T_{th} определена лишь в равновесии.

Другой важной характеристикой, используемой для описания диффузионных процессов является дисперсия квадрата центрированных перемещений $\langle \tilde{u}_p^2 \rangle$. В этой связи необходимо найти связь между дисперсиями центрированных и нецентрированных квадратичных величин. В настоящем разделе находятся формулы для нецентрированных величин.

Формула (1.28) позволяет найти математическое ожидание квадрата нецентрированной скорости:

$$\begin{aligned} \langle v_p^2 \rangle &= \frac{\sigma^2}{N^2} \sum_{k,n=0}^{N-1} \cos \left(2\omega_e t \sin \frac{\pi k}{N} \right) \cos \left(2\omega_e t \sin \frac{\pi n}{N} \right) \cdot \\ &\quad \sum_{s,r=0}^{N-1} \langle \rho_s \rho_r \rangle \cos \frac{2\pi k(p-s)}{N} \cos \frac{2\pi n(p-r)}{N} = \\ &= \frac{\sigma^2}{2N} \sum_{k,n=0}^{N-1} \cos \left(2\omega_e t \sin \frac{\pi k}{N} \right) \cos \left(2\omega_e t \sin \frac{\pi n}{N} \right) \delta_{k-n}^N = \frac{\sigma^2}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \cos^2 \left(2\omega_e t \sin \frac{\pi k}{N} \right) \end{aligned} \quad (1.38)$$

При выводе формулы (1.38) использовано свойство независимости случайных величин (1.8) и тождество

$$\sum_{s=0}^{N-1} \cos \frac{2\pi ks}{N} \cos \frac{2\pi ns}{N} = \frac{N}{2} \delta_{k-n}^N, \quad (1.39)$$

Формулу (1.38) удобно представить в виде:

$$\begin{aligned} \langle v_p^2 \rangle &= \frac{\sigma^2}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \cos^2 \left(2\omega_e t \sin \frac{\pi k}{N} \right) = \frac{\sigma^2}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \frac{\cos \left(4\omega_e t \sin \frac{\pi k}{N} \right) + 1}{2} = \\ &= \frac{\sigma^2}{2} + \frac{\sigma^2}{2N} \sum_{k=0}^{N-1} \cos \left(4\omega_e t \sin \frac{\pi k}{N} \right). \end{aligned} \quad (1.40)$$

Аналогичным образом с помощью (1.26) можно получить выражение и для дисперсии нецентрированных перемещений:

$$\langle u_p^2 \rangle = \frac{\sigma^2}{4N\omega_e^2} \left(4\omega_e^2 t^2 + \sum_{k=1}^{N-1} \frac{\sin^2 \left(2\omega_e t \sin \frac{\pi k}{N} \right)}{\sin^2 \frac{\pi k}{N}} \right). \quad (1.41)$$

Заметим, что пространственно - однородном случае квадратичные величины (1.38) и (1.41) не зависят от пространственного индекса. В следующей части будут получены дифференциальные уравнения, описывающие динамику нецентрированных ковариаций.

1.5 Корреляционный анализ

В настоящей главе для описания нестационарных тепловых процессов в одномерных кристаллах используется метод, основанный на корреляционном анализе, позволяющий получить детерминированные уравнения для статистических характеристик кристалла [96, 64, 62, 63, 77, 123]. Дифференцирование ковариаций (1.36) даёт замкнутую систему уравнений баланса для ковариаций:

$$\dot{\xi}_{pq} = \nu_{pq} + \nu_{qp}, \quad \dot{\kappa}_{pq} = \mathcal{L}_p \nu_{pq} + \mathcal{L}_q \nu_{qp}, \quad \dot{\nu}_{pq} = \kappa_{pq} + \mathcal{L}_q \xi_{qp}, \quad (1.42)$$

где индекс при операторе \mathcal{L} (1.6) указывает тот индекс ковариации, на который действует оператор. Рассмотрим пространственно-однородное состояние, при котором все статистические характеристики не зависят от пространственных координат. Такое состояние реализуется, например, в бесконечном или периодическом одномерном кристалле без дефектов. Тогда для всех величин, зависящих от позиционных индексов p, q , ковариации зависят лишь от разности

индексов $k \stackrel{\text{def}}{=} q - p$. Назовём k корреляционным индексом. Уравнения (1.42) примут вид:

$$\dot{\xi}_k = \nu_n + \nu_{-k}, \quad \dot{\kappa}_k = \mathcal{L}(\nu_k + \nu_{-k}), \quad \dot{\nu}_k = \kappa_k + \mathcal{L}\xi_k, \quad (1.43)$$

где использовано свойство

$$\mathcal{L}_p = \mathcal{L}_q = \mathcal{L}_k. \quad (1.44)$$

Свойство (1.44) можно доказать следующим образом. Представим оператор \mathcal{L}_i в виде:

$$\mathcal{L}_i = \omega_e^2 \Delta_i^2, \quad \Delta_i^2 = h_i + h_i^{-1} + 2, \quad {}_i h u_i \stackrel{\text{def}}{=} u_{i+1}, \quad h_i^{-1} u_i \stackrel{\text{def}}{=} u_{i-1}, \quad (1.45)$$

где $h_i h_i^{-1}$ — операторы сдвига на i части вправо или влево соответственно. Заметим, что связь позиционных индексов p, q и пространственно-корреляционных k, n имеет вид:

$$s \stackrel{\text{def}}{=} p + q, \quad k = q - p. \quad (1.46)$$

Операторы сдвига связаны соотношениями:

$$h_p = h_s h_n^{-1}, \quad h_q = h_s h_k. \quad (1.47)$$

Тогда для вторых разностей отсюда получаем:

$$\Delta_p^2 = h_s h_k^{-1} + h_s^{-1} h_k - 2, \quad \Delta_q^2 = h_s h_k + h_s^{-1} h_k^{-1} - 2. \quad (1.48)$$

В пространственно-однородном состоянии величины не зависят от пространственного индекса k , следовательно в этом случае можно положить $h_k = 1$ и формулы (1.48) принимают вид

$$\Delta_p^2 = \Delta_q^2 = h_s^{-1} + h_s - 2, \quad (1.49)$$

откуда следует независимость линейных операторов от корреляционного индекса в пространственно-однородном случае.

Из уравнений (1.43) можно получить следующие интегрируемое соотношение:

$$\dot{\kappa}_k = \mathcal{L}\xi_k, \quad \dot{\nu}_k = \dot{\nu}_{-k}. \quad (1.50)$$

Интегрирование которых даёт законы сохранения:

$$\kappa_k - \mathcal{L}\xi_k = \epsilon_k^0, \quad \nu_k - \nu_{-k} = 2\mu_k^0, \quad (1.51)$$

где $\mu_k = \frac{1}{2}(\nu_k - \nu_{-k})$, а ϵ_k^0 — константа, имеющая смысл ковариационной энергии. Константы, стоящие в правой части, определяются из начальных условий (они равны значениям левых частей при $t = 0$). Повторное дифференцирование по времени уравнений (1.43) даёт

$$\ddot{\xi}_k = 2(\kappa_k + \mathcal{L}\xi_k), \quad \ddot{\kappa}_k = 2\mathcal{L}(\kappa_k + \mathcal{L}\xi_k), \quad \ddot{\nu}_k = 2\mathcal{L}(\nu_k + \nu_{-k}). \quad (1.52)$$

Замкнутые уравнения для каждой из переменных могут быть получены с помощью законов сохранения (1.51):

$$\ddot{\xi}_k - 4\mathcal{L}\xi_k = 2\epsilon_k^0, \quad \ddot{\kappa}_k - 4\mathcal{L}\kappa_k = -2\mathcal{L}\epsilon_k^0, \quad \ddot{\nu}_k - 4\mathcal{L}\nu_k = 4\mu_{-k}^0. \quad (1.53)$$

С другой стороны, если ввести следующие обозначения для правых частей соотношений (1.52)

$$\lambda_k \stackrel{\text{def}}{=} \kappa_k + \mathcal{L}\xi_k, \quad \eta_k \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2}(\nu_k + \nu_{-k}), \quad (1.54)$$

то для них выполняются уравнения, аналогичные (1.53), но однородные:

$$\ddot{\lambda}_k - 4\mathcal{L}\lambda_k = 0, \quad \ddot{\eta}_k - 4\mathcal{L}\eta_k = 0. \quad (1.55)$$

Уравнения (1.55) с точностью до числового множителя при \mathcal{L} , совпадают с исходным уравнением (1.6) динамики кристалла. После решения уравнений (1.55) остальные переменные находятся из (1.51) и (1.54):

$$\kappa_k = \frac{1}{2}\lambda_k + \frac{1}{2}\epsilon_k^0, \quad \mathcal{L}\xi_k = -\frac{1}{2}\lambda_k + \frac{1}{2}\epsilon_k^0, \quad \nu_k = \eta_k + \mu_k^0. \quad (1.56)$$

Подстановка (1.56) в (1.53) позволяет получить, что для ковариаций действительны следующие дифференциальные уравнения:

$$\ddot{\kappa}_k = 2\lambda_k, \quad \ddot{\xi}_k = 2\mathcal{L}\lambda_k, \quad \ddot{\nu}_k = 4\mathcal{L}\eta_k. \quad (1.57)$$

Введённые выше ковариации $\tilde{\kappa}_k$ и $\tilde{\xi}_k$ тесно связаны с энергетическими характеристиками кристалла. Введём обобщённые кинетическую \mathcal{K} и потенциальную

\mathcal{P} энергии:

$$\mathcal{K}_k = \frac{1}{2}m\kappa_k, \quad \mathcal{P}_k = \frac{1}{2}m\omega_e^2\pi_k, \quad \pi_k \stackrel{\text{def}}{=} \langle \varepsilon_{n+\frac{1}{2}}\varepsilon_{n+k+\frac{1}{2}} \rangle. \quad (1.58)$$

Математическое ожидание кинетической и потенциальной энергий суть обобщённые энергии (1.58) с нулевым индексом. Найдём связь ковариации деформаций π_k с ковариациями перемещений ε_k в рассматриваемом кристалле (1.6) с однородными начальными условиями (1.7):

$$\begin{aligned} \pi_k &= \langle \varepsilon_{n+\frac{1}{2}}\varepsilon_{n+k+\frac{1}{2}} \rangle = \langle (u_n - u_{n-1})(u_{n+k} - u_{n+k-1}) \rangle = \\ &= \langle u_n u_{n+k} \rangle - \langle u_n u_{n+k-1} \rangle - \langle u_{n-1} u_{n+k} \rangle + \langle u_{n-1} u_{n+k-1} \rangle = \\ &= 2\xi_k - \xi_{k-1} - \xi_{k+1} = -\mathcal{L}\xi_k / \omega_e^2. \end{aligned} \quad (1.59)$$

Величины

$$\mathcal{L}_k = \mathcal{K}_k - \mathcal{P}_k, \quad \mathcal{E}_k = \mathcal{K}_k + \mathcal{P}_k \quad (1.60)$$

будем называть обобщённым лагранжианом и обобщённой энергией соответственно, а величину

$$\lambda_k = \kappa_k + \mathcal{L}\xi_k = \kappa_k - \omega_e^2\pi_k \quad (1.61)$$

— приведённым лагранжианом. Очевидно, что приведённый лагранжиан пропорционален обобщённому лагранжиану: $\mathcal{L}_k = \frac{m}{2}\lambda_k$. Таким образом, в настоящем разделе были получены точные детерминированные уравнения для статистических характеристик кристалла, показана связь между ковариациями и энергитическими характеристиками кристалла.

В следующей части будет показано, как нецентрированные ковариации связаны с материально-объективными характеристиками кристалла — центрированными ковариациями.

1.6 Центрированные квадратичные величины

В настоящей главе получены точные аналитические формулы для дисперсий скоростей и перемещений.

Рассмотрим оператор пространственного осреднения для некоторой величины с одним пространственным индексом:

$$\{f_n\} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{N} \sum_{s=0}^{N-1} f_s, \quad (1.62)$$

и введём обозначения:

$$\bar{u} \stackrel{\text{def}}{=} \{u_n\}, \quad \bar{v} \stackrel{\text{def}}{=} \{v_n\}, \quad \bar{\rho} \stackrel{\text{def}}{=} \{\rho_n\} = \frac{\varrho}{\sqrt{N}}, \quad (1.63)$$

где ϱ — случайная величина с нулевым математическим ожиданием и единичной дисперсией:

$$\langle \bar{\rho}^2 \rangle = \frac{1}{N}. \quad (1.64)$$

Подстановка выражения для \bar{u} (1.63) в уравнения для начальной задачи динамики кристалла (1.6)-(1.7) даёт следующие соотношения:

$$\ddot{\bar{u}} = \dot{\bar{v}} = 0, \quad \bar{u} \Big|_{t=0} = 0. \quad (1.65)$$

Так как производная средней скорости равна нулю, то средняя скорость — константа, а её значение может быть найдено из начальных условий:

$$\bar{v} = \bar{v} \Big|_{t=0} = \sigma \bar{\rho}. \quad (1.66)$$

Введём центрированную скорость:

$$\tilde{v}_n = v_n - \bar{v}. \quad (1.67)$$

Ковариация центрированных скоростей представимо в следующем виде:

$$\tilde{\kappa}_k \stackrel{\text{def}}{=} \langle \tilde{v}_n \tilde{v}_{n+k} \rangle = \langle v_n v_{n+k} \rangle - \langle v_n \bar{v} \rangle - \langle \bar{v} v_{n+k} \rangle + \langle \bar{v}^2 \rangle. \quad (1.68)$$

Последние слагаемые в выражении (1.68) с учётом (1.64) равны:

$$\langle v_n \bar{v} \rangle = \langle v_{n+k} \bar{v} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{s=0}^{N-1} \langle v_n v_{n+s} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{s=0}^{N-1} \kappa_s, \quad \langle \bar{v}^2 \rangle = \sigma^2 \langle \bar{\rho}^2 \rangle = \frac{\sigma^2}{N}, \quad (1.69)$$

отсюда, получаем:

$$\tilde{\kappa}_k = \kappa_k - \frac{2}{N} \sum_{s=0}^{N-1} \kappa_s + \frac{\sigma^2}{N}. \quad (1.70)$$

Упростим выражение (1.70). Продифференцируем ковариацию скоростей κ_k (1.42):

$$\dot{\kappa}_k = 2\mathcal{L}\nu_k. \quad (1.71)$$

Выразим сумму всех производных ковариаций скоростей через новую переменную:

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^{N-1} \dot{\kappa}_k &= 2 \sum_{s=0}^{N-1} \mathcal{L}\nu_k = 2((\nu_{N-1} - 2\nu_0 + \nu_1) + (\nu_0 - 2\nu_1 + \nu_2) + \dots) + \dots \\ &+ (\nu_{N-2} - 2\nu_{N-1} + \nu_0) = 0. \end{aligned} \quad (1.72)$$

Отсюда следует, что

$$\sum_{k=0}^{N-1} \kappa_k = \text{const}. \quad (1.73)$$

Значение константы в выражении (1.73) определим из начальных условий:

$$t = 0 : \quad \sum_{k=0}^{N-1} \kappa_k = \sum_{k=0}^{N-1} \langle v_n v_{n+k} \rangle = \sigma^2 \sum_{k=0}^{N-1} \langle \rho_n \rho_{n+k} \rangle = \sigma^2 \sum_{k=0}^{N-1} \delta_k = \sigma^2. \quad (1.74)$$

Подставляя (1.73) в (1.70) получим связь между центрированными и нецентрированными ковариациями:

$$\tilde{\kappa}_k = \kappa_k - \frac{2\sigma^2}{N} + \frac{\sigma^2}{N} = \tilde{\kappa}_k = \kappa_k - \frac{\sigma^2}{N} \quad (1.75)$$

Следовательно, математическое ожидание квадрата центрированной скорости, пропорциональное кинетической температуре получается из квадрата математического ожидания нецентрированной скорости отбрасыванием первого слагаемого в сумме (1.38) или (1.40):

$$\langle \tilde{v}_p^2 \rangle = \frac{\sigma^2}{N} \sum_{k=1}^{N-1} \cos^2 \left(2\omega_e t \sin \frac{\pi k}{N} \right) = \frac{\sigma^2}{2} + \frac{\sigma^2}{2N} \sum_{k=1}^{N-1} \cos \left(4\omega_e t \sin \frac{\pi k}{N} \right). \quad (1.76)$$

Иными словами нецентрированная дисперсия скоростей $\langle v_p^2 \rangle$ определяется суммой от 0 до N, а центрированная дисперсия скоростей $\langle \tilde{v}_p^2 \rangle$ — той же суммой, но от 1 до N.

Рассмотрим теперь ковариацию центрированных перемещений

$$\langle \tilde{u}_p \tilde{u}_q \rangle = \langle u_p u_q \rangle - \langle u_p \bar{u} \rangle - \langle u_q \bar{u} \rangle + \langle \bar{u}^2 \rangle. \quad (1.77)$$

Дисперсия среднего перемещения (последнее слагаемое в выражении (1.77)) определяется с помощью возведения уравнения $\bar{u} = \bar{v}t$ в квадрат и последующей подстановки в выражение для $\langle \bar{v}^2 \rangle$ (второе выражение (1.69)):

$$\langle \bar{u}^2 \rangle = \frac{\sigma^2 t}{N}. \quad (1.78)$$

Заметим, что согласно первому выражению из (1.69) и (1.74) имеем:

$$\langle u_p \bar{v} \rangle = \langle v_p \bar{v} \rangle + \langle u_p \dot{\bar{v}} \rangle = \frac{\sigma^2}{N}. \quad (1.79)$$

Интегрируя выражение (1.79) по времени находим:

$$\langle u_p \bar{v} \rangle = \frac{\sigma^2 t}{N}, \quad \langle u_p \bar{u} \rangle = \frac{\sigma^2 t^2}{N} = \langle \bar{u}^2 \rangle, \quad (1.80)$$

где использовано $u_p \Big|_{t=0} = 0$. Введя ковариационный индекс $k = p - q$ выражение для ковариации центрированных перемещений примет вид:

$$\tilde{\xi}_k \stackrel{\text{def}}{=} \langle \tilde{u}_n \tilde{u}_{n+k} \rangle = \xi_k - \langle \bar{u}^2 \rangle = \xi_k - \frac{\sigma^2 t^2}{N}, \quad (1.81)$$

Отсюда, из выражения (1.41) для дисперсии центрированных перемещений получаем

$$\langle \tilde{u}_p^2 \rangle = \frac{\sigma^2}{N} \sum_{k=1}^{N-1} \frac{\sin^2(\Omega_k t)}{\Omega_k}, \quad \Omega_k \stackrel{\text{def}}{=} 2\omega_e t \sin \frac{\pi k}{N}. \quad (1.82)$$

В настоящем разделе получены формулы для квадратичных переменных — дисперсий центрированных перемещений (1.82) и центрированных скоростей (1.76). Данные формулы могут быть использованы для анализа переходных процессов, реализующиеся в бесконечном одномерном кристалле.

Настоящие формулы могут быть получены путём анализа ковариаций, для которых, оказывается возможным записать замкнутую систему дифференциальных уравнений. Анализ ковариаций позволяет получить решения общего вида для обширного класса задач — в этом состоит его преимущество перед изложенным выше решением.

1.7 Колебания энергий при мгновенном тепловом возмущении

Выше было показано дифференцирование ковариаций (1.36) с учётом уравнения динамики цепочки (1.6) приводит к замкнутой системе динамических уравнений для ковариаций (1.53). Наиболее простая форма может быть получена с использованием дополнительной переменной — приведённого лагранжиана (1.55). В настоящей главе рассмотрим динамику ковариаций для кристалла подвергнуто в начальный момент времени тепловому удару (1.6) — (1.7). Начальной задаче (1.6) — (1.7) соответствует следующая начальная задача для приведённого лагранжиана:

$$\begin{aligned} \lambda_k &= \kappa_k + \mathcal{L}\xi_k, & \ddot{\lambda}_k &= 4\mathcal{L}\lambda_k, \\ t = 0: & \lambda_k = \sigma^2 \delta_k^N, & \dot{\lambda}_k &= 0. \end{aligned} \quad (1.83)$$

Из условий периодичности (второе уравнение (1.6)) следуют аналогичные условия периодичности для ковариаций и, соответственно, для приведённого лагранжиана:

$$\xi_{k+N} = \xi_k, \quad \kappa_{k+N} = \kappa_k, \quad \nu_{k+N} = \nu_k, \quad \lambda_{k+N} = \lambda_k. \quad (1.84)$$

Таким образом две задачи оказываются эквивалентными точностью до коэффициентов: задача для ковариаций (1.84) и начальная задача для одномерного кристалла (1.6). Решение задачи для ковариаций (1.84) может быть получено применением дискретного преобразования Фурье к начальной задаче (1.83):

$$\begin{aligned} \ddot{\lambda}_s^* + 4L^* \lambda_s^* &= 0, \\ t = 0: & \lambda_s^* = \sigma^2, \quad \dot{\lambda}_s^* = 0, \end{aligned} \quad (1.85)$$

где

$$L^* = 4\omega_e^2 \sin^2 \frac{\pi s}{N}, \quad \lambda_s^* = \sum_{k=0}^{N-1} \lambda_k e^{\frac{-2\pi i s k}{N}} \quad (1.86)$$

(см. задачу на перемещения частиц кристалла (1.18)). Решение задачи (1.85) есть следующие выражение:

$$\lambda_s^* = \sigma^2 \cos \left(4\omega_e t \sin \frac{\pi s}{N} \right). \quad (1.87)$$

Обратное преобразование фурье для λ_s^* даёт

$$\lambda_k = \frac{\sigma^2}{N} \sum_{s=0}^{N-1} \cos \left(4\omega_e t \sin \frac{\pi s}{N} \right) e^{i \frac{2\pi k s}{N}}. \quad (1.88)$$

Извлекая вещественную часть из выражения (1.88)

$$\lambda_k = \frac{\sigma^2}{N} \sum_{s=0}^{N-1} \cos q_s n \cos(2\Omega_s t), \quad q_s \stackrel{\text{def}}{=} \frac{2\pi s}{N}, \quad \Omega_s \stackrel{\text{def}}{=} 2\omega_e \sin \frac{\pi s}{N}. \quad (1.89)$$

После определения λ_k ковариации перемещений и скоростей находятся из соотношений (1.56)-(1.57):

$$2\kappa_k = \lambda_k + \epsilon_k^0, \quad \ddot{\xi}_k = 2\lambda_k, \quad \xi_k|_{t=0} = 0, \quad \dot{\xi}_k|_{t=0} = 0; \quad (1.90)$$

а дисперсии перемещений и скоростей определяются значениями ковариаций при $k = 0$. Применяя первую из формул (1.90) для $\kappa_n|_{n=0}$ находим

$$\kappa_0 = \frac{\sigma^2}{2} + \frac{\sigma^2}{2N} \sum_{k=0}^{N-1} \cos \left(4\omega_e t \sin \frac{\pi k}{N} \right), \quad (1.91)$$

что совпадает с формулой (1.40).

Математическое ожидание кинетической энергии выражается через ковариацию скоростей с нулевым индексом: κ_0 :

$$\mathcal{K} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{m}{2} \tilde{\kappa}_0, \quad (1.92)$$

где $\tilde{\kappa}_0$ — ковариация центрированных величин (1.76):

$$\begin{aligned} \tilde{\kappa}_0 &= \frac{\sigma^2}{2} + \frac{\sigma^2}{2N} \sum_{k=1}^{N-1} \cos \left(4\omega_e t \sin \frac{\pi k}{N} \right) = \\ &= \frac{\sigma^2}{2} \left(1 - \frac{2}{N} \right) + \frac{\sigma^2}{2N} \sum_{k=0}^{N-1} \cos \left(4\omega_e t \sin \frac{\pi k}{N} \right). \end{aligned} \quad (1.93)$$

Ниже под «кинетической энергией» будет всегда подразумеваться математическое ожидание кинетической энергии \mathcal{K} . Переходя к пределу бесконечно кристалла $N \rightarrow \infty$ в выражении (1.93), согласно формуле 9.1.22 [1] кинетическая энергия имеет следующие интегральное представление:

$$\mathcal{K} = \frac{m\sigma^2}{4} + \frac{m\sigma^2}{4} \int_0^\infty \cos(4\omega_e t \sin(\pi x)) dx = \frac{m\sigma^2}{4} + \frac{m\sigma^2}{4} J_0(4\omega_e t). \quad (1.94)$$

Потенциальная энергия кристалла может быть найдена из закона сохранения (1.51):

$$\mathcal{P} = \frac{m}{C} \tilde{\pi}_0 = -\frac{m}{C} \mathcal{L} \tilde{\xi}_0 = -\frac{m}{C} (\tilde{\epsilon}_0^0 - \tilde{\kappa}_0), \quad (1.95)$$

что в случае бесконечного кристалла с использование выражения (1.94) даёт

$$\mathcal{P} = -\frac{m}{C} \left(\frac{\sigma^2}{2} - \frac{\sigma^2}{2} J_0(4\omega_e t) \right), \quad (1.96)$$

Кинетическая температура кристалла (1.37) также пропорциональна κ_0 :

$$T = \frac{m}{k_B} \tilde{\kappa}_0, \quad (1.97)$$

На рисунке 1.1 изображены колебания кинетической температуры в одномерном кристалле. По видимому, впервые, ковариационный анализ для изучения

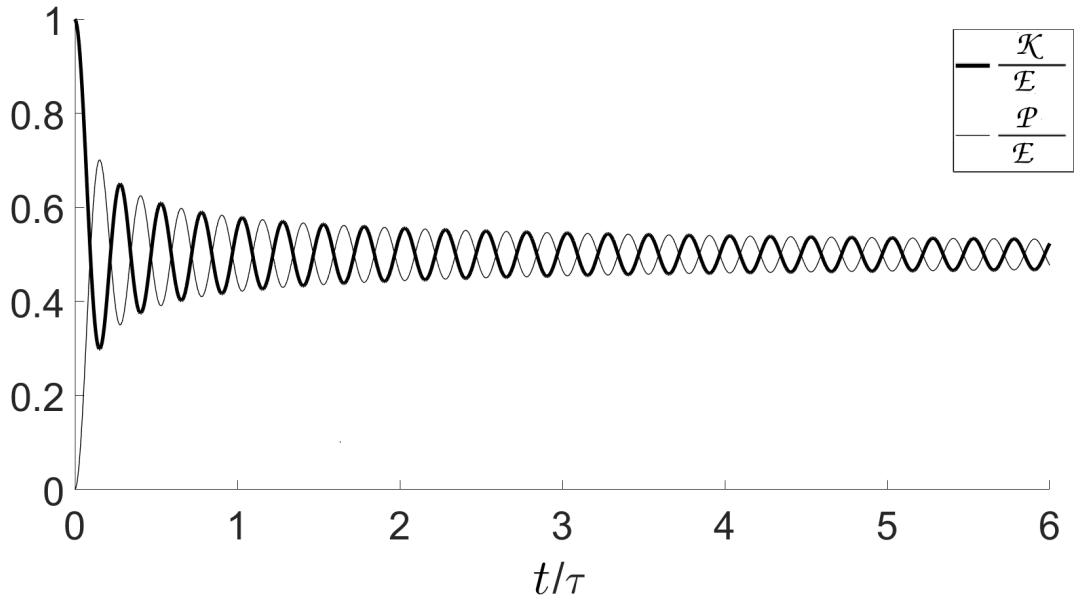


Рис. 1.1: На рисунке изображены колебания амплитуд математических ожиданий кинетической энергии \mathcal{K} и потенциальной энергии \mathcal{P} в бесконечном кристалле после мгновенной нагрузки при $t = 0$, $\tau = \frac{2\pi}{\omega_e}$ — начальная температура кристалла.

колебаний энергий в одномерных кристаллах использован в работе А.М. Кривцова [62].

Глава 2

Колебания кинетической температуры

Без фантазии нет искусства,
как нет и науки.

Ференц Лист

2.1 Введение

В кристаллических телах реализуются тепловые процессы с различными масштабами характерных времён. Условно, все процессы можно разделить на быстрые и медленные, где первые отвечают за перераспределение энергии по степеням свободы, что приводит к переходу кристаллической системы в состояние теплового равновесия. Медленные процессы связаны с переносом тепла в системе. В настоящей работе мы ограничиваемся рассмотрением лишь быстрых процессов. Как уже говорилось, технологии генерации фемтосекундных [99, 69, 113] и аттосекундных [114, 74, 25] лазерных импульсов позволят в ближайшем будущем провести экспериментальную проверку изложенной теории.

Стремительное развитие нанотехнологий заставило обратить внимание исследователей на системы, содержащие конечное число атомов [36, 68, 85, 50]. Тепловые и диффузионные процессы в таких системах существенно отличаются от процессов в бесконечных кристаллах. Эти отличия связаны с ограниченностью рассматриваемых систем.

В настоящей главе рассматриваются быстрые тепловые процессы в конечных кристаллах, инициированные мгновенным тепловым возмущением. Показано,

что в таких системах периодически самопроизвольно возобновляются резкие «всплески» амплитуды колебаний кинетической температуры — реализуется явление «теплового эха».

2.2 Динамика ковариаций

В настоящей главе рассматривается описанная выше модель одномерного кристалла, с периодическими граничными условиями (1.6). Начальные условия соответствуют мгновенному тепловому удару (1.7):

$$\begin{aligned} \ddot{u}_n &= \mathcal{L}u_n \stackrel{\text{def}}{=} \omega_e^2(u_{n-1} - 2u_n + u_{n+1}), & \omega_e &\stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\frac{C}{m}}, \\ u_0 &= u_N, & u_{N+1} &= u_1, \\ t = 0: & & u_n &= 0, & \dot{u}_n &= \sigma \rho_n. \end{aligned} \quad (2.1)$$

Заметим, что для результатов полученных в настоящей главе существенным является тот факт, что число частиц N в рассматриваемом кристалле конечно, хоть и может быть сколь угодно велико.

Одной из ключевых статистических характеристик кристалла является кинетическая температура T , которая может быть определена математическим ожиданием $\langle \dots \rangle$ квадрата центрированной скорости \tilde{v}_k . Соответствующая формула для одномерного случая выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned} T &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{m}{k_B} \langle \tilde{v}_k^2 \rangle, \\ \tilde{v}_k &\stackrel{\text{def}}{=} v_k - \bar{v}, & \bar{v} &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} v_k. \end{aligned} \quad (2.2)$$

где \bar{v} — скорость центра масс системы.

Получение замкнутой системы уравнений для статистических характеристик возможно в рамках ковариационного анализа [64, 62, 77]. Как было показано выше, для этого необходимо рассмотрение ковариаций центрированных и нецентрированных скоростей

$$\kappa_n \stackrel{\text{def}}{=} \langle v_k v_{k+n} \rangle, \quad \tilde{\kappa}_n \stackrel{\text{def}}{=} \langle \tilde{v}_k \tilde{v}_{k+n} \rangle \quad (2.3)$$

являющимися величинами, характеризующими движение пар частиц. Взаимосвязь между ковариациями центрированных и нецентрированных величин даётся формулой (1.70):

$$\tilde{\kappa}_n \stackrel{\text{def}}{=} \kappa_n - \frac{\sigma^2}{N}. \quad (2.4)$$

Начальная задача для центрированных ковариаций может быть получена путем дифференцирования ковариаций (2.3) с использованием соотношений (2.1):

$$\begin{aligned} \ddot{\tilde{\kappa}}_n - 4\mathcal{L}\tilde{\kappa}_n &= -2\mathcal{L}\tilde{\kappa}_n^0, \\ t = 0: \quad \tilde{\kappa}_n &= \tilde{\kappa}_n^0 \stackrel{\text{def}}{=} \sigma^2 \delta_n^N - \frac{\sigma^2}{N}, \quad \dot{\tilde{\kappa}}_n = 0, \end{aligned} \quad (2.5)$$

где δ_n^N — обобщённый символ Кронекера, такой что $\delta_n^N = 1$ для n , делящихся на N (включая $n = 0$), во всех иных случаях $\delta_n^N = 0$.

Как и в случае бесконечного кристалла, в случае конечного, задача для ковариаций (2.5) оказывается эквивалентна начальной задаче для одномерного кристалла (1.6). Основное отличие начальных задач (2.5) и (1.6)–(1.7) состоит в следующем: задача (2.5) описывает динамику детерминированных величин $\tilde{\kappa}_n$, однако же начальная задача (1.6)–(1.7) — стохастических величин u_k . При этом, главное отличие заключается в начальных условиях: для задачи (2.5) они детерминированы, с другой стороны, для задачи (1.6)–(1.7) начальные условия — стохастические.

Кинетическая температура кристалла находится с помощью формулы (2.2), которая может быть записана следующим образом:

$$T = \frac{m}{k_B} \tilde{\kappa}_n \Big|_{n=0} = \frac{m}{k_B} \left(\kappa_n - \frac{\sigma^2}{N} \right) \Big|_{n=0}, \quad (2.6)$$

В следующей главе методом Фурье находится решение задачи (2.5).

2.3 Представление через функции Бесселя

Решение задачи (2.5) представим методом Фурье. Применяя дискретное Фурье преобразование

$$\kappa_k^* = \sum_{n=0}^{N-1} \tilde{\kappa}_n e^{\frac{-2\pi i k n}{N}} \quad (2.7)$$

к задаче (2.5) даёт следующую начальную задачу:

$$\begin{aligned} \ddot{\check{\kappa}}_k + 4L\check{\kappa}_k &= 0, \\ t = 0: \quad \check{\kappa}_k &= \frac{\sigma^2}{2} - \sigma^2 \delta_k, \quad \dot{\check{\kappa}}_k = 0, \end{aligned} \quad (2.8)$$

где

$$\check{\kappa}_k = \kappa_k^* - \frac{\sigma^2}{2}, \quad L = 4\omega_e^2 \sin^2 \frac{\pi k}{N}. \quad (2.9)$$

Решение этой задачи (2.8) представимо в виде:

$$\check{\kappa}_k = \frac{\sigma^2}{2} (1 - 2\delta_k) \cos \left(4\omega_e t \sin \frac{\pi k}{N} \right), \quad (2.10)$$

отсюда получаем выражение для κ_k^* :

$$\kappa_k^* = \frac{\sigma^2}{2} (1 - 2\delta_k) \cos \left(4\omega_e t \sin \frac{\pi k}{N} \right) + \frac{\sigma^2}{2}. \quad (2.11)$$

Обратное фурье преобразование даёт значение центрированной ковариации скоростей

$$\tilde{\kappa}_n = \frac{1}{N} \frac{\sigma^2}{2} \sum_{k=0}^{N-1} \left(1 + \cos \left(4\omega_e t \sin \frac{\pi k}{N} \right) \right) e^{i \frac{2\pi n k}{N}} - \frac{\sigma^2}{N}. \quad (2.12)$$

Практическое значение имеет лишь ковариация $\tilde{\kappa}_n|_{n=0}$ которая пропорциональна температуре:

$$\tilde{\kappa}_n|_{n=0} = \frac{\sigma^2}{2} \left(1 - \frac{2}{N} \right) + \frac{1}{N} \frac{\sigma^2}{2} \sum_{k=0}^{N-1} \cos \left(4\omega_e t \sin \frac{\pi k}{N} \right). \quad (2.13)$$

Выражение (2.13) может быть представлено в следующей форме:

$$\begin{aligned} \tilde{\kappa}_n|_{n=0} &= \frac{\sigma^2}{2} \left(1 - \frac{1}{N} \right) \left(1 - \frac{1}{N-1} \right) + \\ &\frac{1}{N} \frac{\sigma^2}{2} \left(1 - \frac{1}{N} \right) \left(1 + \frac{1}{N-1} \right) \sum_{k=0}^{N-1} \cos \left(4\omega_e t \sin \frac{\pi k}{N} \right). \end{aligned} \quad (2.14)$$

Перепишем выражение (2.14) в терминах кинетической температуры. Сперва заметим, что согласно начальному условию (2.5) и формуле (2.6) скачок температуры, первоначально вызванный тепловым возмущением есть

$$\Delta T \stackrel{\text{def}}{=} \frac{m}{k_B} \tilde{\kappa}_n^0 \Big|_{n=0} = \sigma^2 \left(1 - \frac{1}{N} \right). \quad (2.15)$$

Выражение (2.14) может быть представлено в следующем виде для того, чтобы учесть пропорциональность скачку температуры, в начальный момент времени ΔT :

$$T = T_E + \frac{\delta T}{2N} \sum_{k=0}^{N-1} \cos \left(4\omega_e t \sin \frac{\pi k}{N} \right) \quad (2.16)$$

где

$$T_E \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\Delta T}{2} \left(1 - \frac{1}{N-1} \right), \quad \delta T \stackrel{\text{def}}{=} \Delta T \left(1 + \frac{1}{N-1} \right). \quad (2.17)$$

Величину T_E будем называть равновесной температурой. Для бесконечного кристалла кинетическая температура стремится к T_E , в случае же конечного кристалла температура сцинтиллирует в окрестности T_E .

Выражение (2.16) точно описывает зависимость от времени кинетической температуры гармонического кристалла после мгновенного теплового возмущения. Приведённая зависимость удобна для численных расчётов, однако практическое использование этой формулы для аналитического анализа вызывает трудности. Дело в том, что для наиболее интересного с практической точки зрения случая, при рассмотрении кристаллов, содержащих большое число частиц N формула (2.16) содержит большое количество слагаемых. При этом все слагаемые равноправны, что не даёт возможности пренебречь каким то их количеством. Поэтому ниже выводится альтернативное представление для температуры кристалла, выраженное через функции Бесселя — более удобное для аналитического анализа.

Рассмотрим следующие тождество [1]:

$$\cos(z \sin \vartheta) = \sum_{p=-\infty}^{\infty} J_{2p}(z) \cos(2p \vartheta), \quad (2.18)$$

где $J_{2p}(t)$ — функция Бесселя первого рода порядка $2p$. Произведём подстановку $\vartheta = \pi k/N$ в выражение (2.18) и просуммируем по k . Тогда справа получим

$$\frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \cos\left(z \sin \frac{\pi k}{N}\right) = \sum_{p=-\infty}^{\infty} J_{2p}(z) \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \cos\left(2p \frac{\pi k}{N}\right). \quad (2.19)$$

Покажем, что сумма кратных углов косинуса, представима в следующем виде:

$$\frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \cos\left(p \frac{2\pi k}{N}\right) = \delta_p^N, \quad (2.20)$$

где δ_p^N — периодический дельта-символ Кронекера: $\delta_p^N = 1$, если p делится на N , иначе $\delta_p^N = 0$. Сумма косинусов нескольких углов может быть вычислена как сумма комплексных экспонент, которая рассчитывается, как сумма геометрической прогрессии:

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^{N-1} \cos k\phi &= \operatorname{Re} \sum_{k=0}^{N-1} e^{ik\phi} = \operatorname{Re} \left(\frac{e^{iN\phi} - 1}{e^{i\phi} - 1} \right) = \operatorname{Re} \frac{(e^{iN\phi} - 1)(e^{-i\phi} - 1)}{(e^{i\phi} - 1)(e^{-i\phi} - 1)} = \\ &= \operatorname{Re} \frac{e^{i(N-1)\phi} - e^{iN\phi} - e^{-i\phi} + 1}{2 - e^{i\phi} - e^{-i\phi}} = \frac{\cos((N-1)\phi) - \cos N\phi - \cos \phi + 1}{2(1 - \cos \phi)} = \\ &= \frac{\sin((2N-1)\frac{\phi}{2}) \sin \frac{\phi}{2} + \sin^2 \frac{\phi}{2}}{2 \sin^2 \frac{\phi}{2}} = \frac{1}{2} + \frac{\sin((2N-1)\frac{\phi}{2})}{2 \sin \frac{\phi}{2}} = \frac{\sin(N\frac{\phi}{2}) \cos((N-1)\frac{\phi}{2})}{\sin \frac{\phi}{2}} = \\ &= \frac{1}{2} \sin(N\phi) \operatorname{ctg} \frac{\phi}{2} + \sin^2 \left(N \frac{\phi}{2} \right) \end{aligned} \quad (2.21)$$

Подстановка $\phi = 2\pi p/N$ в (2.21) даёт нам следующее представление:

$$\frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \cos\left(p \frac{2\pi k}{N}\right) = \frac{\sin(2\pi p)}{2N} \operatorname{ctg} \frac{\pi p}{N} + \frac{\sin^2(\pi p)}{N}. \quad (2.22)$$

Заметим, что второе слагаемое в правой части выражения (2.22) $\sin^2(\pi p)/N$ для всех целых p равно нулю. Для всех целых p множитель $\sin(2\pi p)/2N$ в первом слагаемом в правой части выражения (2.22) также равен нулю. Таким образом, для всех p при которых котангенс в первом слагаемом в правой части выражения (2.22) принимает вещественные значения, выражение (2.22) равно нулю. При значениях p делящихся на N , в правой части выражения (2.22) возникает неопределённость и значение выражения (2.22) можно вычислить как значение

суммы в левой части: оно равно 1, так каждое слагаемое (косинус кратного угла) равно 1. Окончательно, приходим к выражению (2.20), а для (2.19) поэтому получаем:

$$\frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \cos \left(z \sin \frac{\pi k}{N} \right) = \sum_{p=-\infty}^{\infty} J_{2p}(z) \delta_p^N, \quad (2.23)$$

С использованием определения дельта-функции δ_p^N (2.20), выражение (2.23), имеет вид:

$$\frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \cos \left(z \sin \frac{\pi k}{N} \right) = \sum_{p=-\infty}^{\infty} J_{2pN}(z). \quad (2.24)$$

Подстановка полученной формулы в выражение (2.16) дает

$$\begin{aligned} T &= T_E + \frac{\delta T}{2} \sum_{p=-\infty}^{\infty} J_{2pN}(4\omega_e t) = \\ &= T_E + \frac{\delta T}{2} J_0(4\omega_e t) + \delta T \sum_{p=1}^{\infty} J_{2pN}(4\omega_e t), \end{aligned} \quad (2.25)$$

где использовано тождество $J_{-2pN} \equiv J_{2pN}$, а T_E и δT определены в (2.17). Таким образом, кинетическая температура может быть представлена как равновесная температура плюс сумма членов, пропорциональных функциям Бесселя кратных порядков.

Оба выражения (2.16) и (2.25) являются точными, но выражение (2.25) больше подходит для аналитического анализа. Действительно, для положительного целочисленного индекса μ функция Бесселя $J_\mu(x)$ почти равна нулю для всех положительных x вплоть до окрестности точки $x = \mu$. Следовательно, для конечного момента времени только конечное число членов даёт заметный вклад в представление (2.25).

В качестве иллюстрации рассмотрим ряд

$$S(x) = J_0(x) + 2J_\mu(x) + 2J_{2\mu}(x) + \dots + 2J_{p\mu}(x) + \dots \quad (2.26)$$

Графики для $S(x)$ и первые три члена представления (2.26) показаны на рис. 2.1.

На рисунке показано, что почти¹ для всего интервал $[0, \mu)$ сумма $S(x)$ опреде-

¹За исключением небольшой окрестности правой границы $x = \mu$. Ширина этой окрестности может быть определена выражением (2.45)

ляется только первым слагаемым в выражении (2.26). Аналогично, для почти всего интервала $[\mu, 2\mu)$ сумма $S(x)$ определяется первыми двумя слагаемыми и т.д.

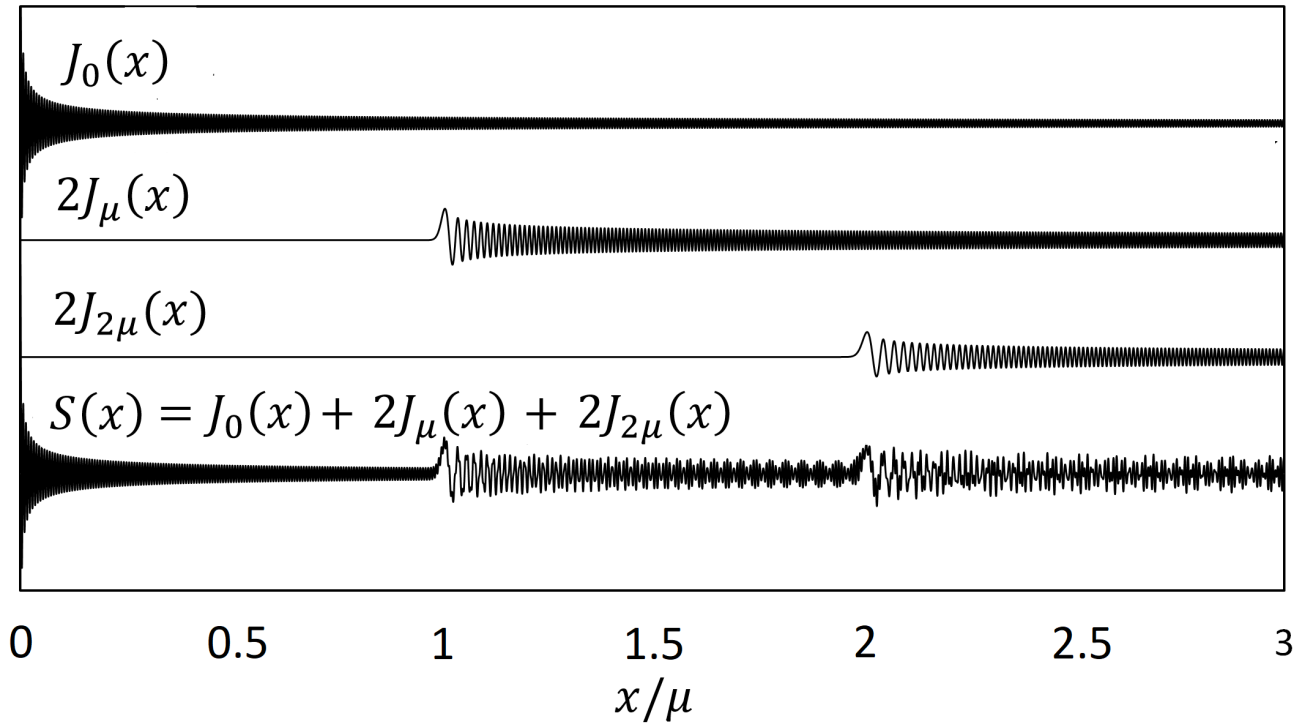


Рис. 2.1: Функции Бесселя с кратными порядками $\mu = 10^3$ (три верхних графика); сумма функций Бесселя (нижний график).

Если кристалл имеет *ненулевую* начальную температуру T_0 до теплового возмущения, тогда равновесная температура (2.17) содержит дополнительный член T_0 :

$$T_E \stackrel{\text{def}}{=} T_0 + \frac{\Delta T}{2} \left(1 - \frac{1}{N-1} \right), \quad (2.27)$$

в то время как выражения (2.25) остаются без изменений. Это является прямым следствием принципа суперпозиции, который справедлив для гармонических систем. Пусть

$$\tilde{T} \stackrel{\text{def}}{=} T - T_E = \frac{\delta T}{2} \left(J_0(4\omega_e t) + 2 \sum_{p=1}^{\infty} J_{2pN}(4\omega_e t) \right), \quad (2.28)$$

где $\delta T = \Delta T \left(1 + \frac{1}{N-1} \right)$ (2.17), ΔT — скачок температуры, то есть разность между температурой кристалла в момент времени сразу после температурного возмущения и температурой в момент времени, непосредственно предшествующий температурному возмущению. Как следует из выражения (2.28), равновесная температура T_E — это температура, достигаемая когда $N \rightarrow \infty$, $t \rightarrow \infty$ (состояние термодинамического равновесия бесконечного кристалла).

2.4 Осцилляции кинетической температуры

2.4.1 Тепловое эхо

Согласно теореме о вириале [115, 47] в гармонических системах осреднённые по времени значения кинетической и потенциальной энергий стремятся к одной и той же величине. Ранее проведённые исследования [62, 75] показали, что в одномерном бесконечном гармоническом кристалле этот процесс уравнивания сопровождается колебаниями энергии (и, следовательно, температуры), описываемыми функцией Бесселя нулевого порядка. Согласно формуле (2.25) тот же процесс в конечном гармоническом кристалле описывается бесконечным рядом функций Бесселя с кратными порядками.

Это явление, проявляющееся в резком повышении амплитуды колебаний кинетической температуры, которое называется тепловым эхом, можно интерпре-

тировать следующим образом. Решение исходной задачи (2.1) в силу линейности системы может быть представлено как суперпозиция N задач для каждой отдельной частицы, где только этой определённой частице была передана случайная скорость в начальный момент времени. В каждой рассматриваемой задаче от выведенной из равновесия частицы упругие волны распространяются вправо и влево по кристаллу, а суперпозиция этих волн для всех частиц описывает тепловой процесс в кристалле. Так как кристалл является периодическим (замкнутым в кольцо), упругие волны встречаются друг с другом после того, как они прошли половину длины кристалла. Так как все частицы подвергаются возмущению мгновенно, упругие волны, инициируемые каждой частицей, встречаются одновременно, вызывая резкое кратковременное повышение кинетической температуры системы — первое тепловое эхо. Затем волны движутся дальше и встречаются снова — реализуется второе тепловое эхо и так далее. Каждое тепловое эхо (2.25) выражается через функции Бесселя порядка $2pN$, где $p = 1, 2, 3, \dots$ — число реализаций теплового эха.

Кристалл — это дискретная система с дисперсией — скорость волны зависит от её длины. Наиболее быстрыми являются длинные волны, которые распространяются со скоростью звука $c_s = a\omega_e$ [12, ?], где a — шаг решетки, а ω_e — элементарная частота (1.6). Эти волны встречаются после того, как они проходят половину длины кристалла, поэтому период теплового эха выражается следующей формулой:

$$\tau_0 = \frac{L}{2c_s} = \frac{N}{2\omega_e}, \quad (2.29)$$

где $L = Na$ — длина кристалла. Количество событий реализации теплового эха в системе до момента времени t можно получить с помощью отношения t/τ_0 . Более короткие волны медленнее и встречаются позже — поэтому тепловое эхо имеет конечную ширину, и, следовательно, каждое следующее тепловой эхо менее заметно.

Время $t = p\tau_0$ мы будем называть опорным временем для теплового эха с номером p . К этому времени длинные волны от начального теплового возмущения встретились p раз, вызвав соответствующие p реализаций теплового эха.

2.4.2 Реализации теплового эха

Используя формулу (2.25), кинетическая температура может быть представлена в виде:

$$\begin{aligned} T &= T_E + T_B + T_1 + T_2 + \dots + T_p + \dots; \\ T_B &= \frac{\delta T}{2} J_0(4\omega_e t), \quad T_p = \delta T J_{2pN}(4\omega_e t); \end{aligned} \quad (2.30)$$

где T_E — это равновесная температура (2.25), T_B — основная тепловая мода, а последующие члены T_p — тепловые моды с номерами $p = 1, 2, 3, \dots$

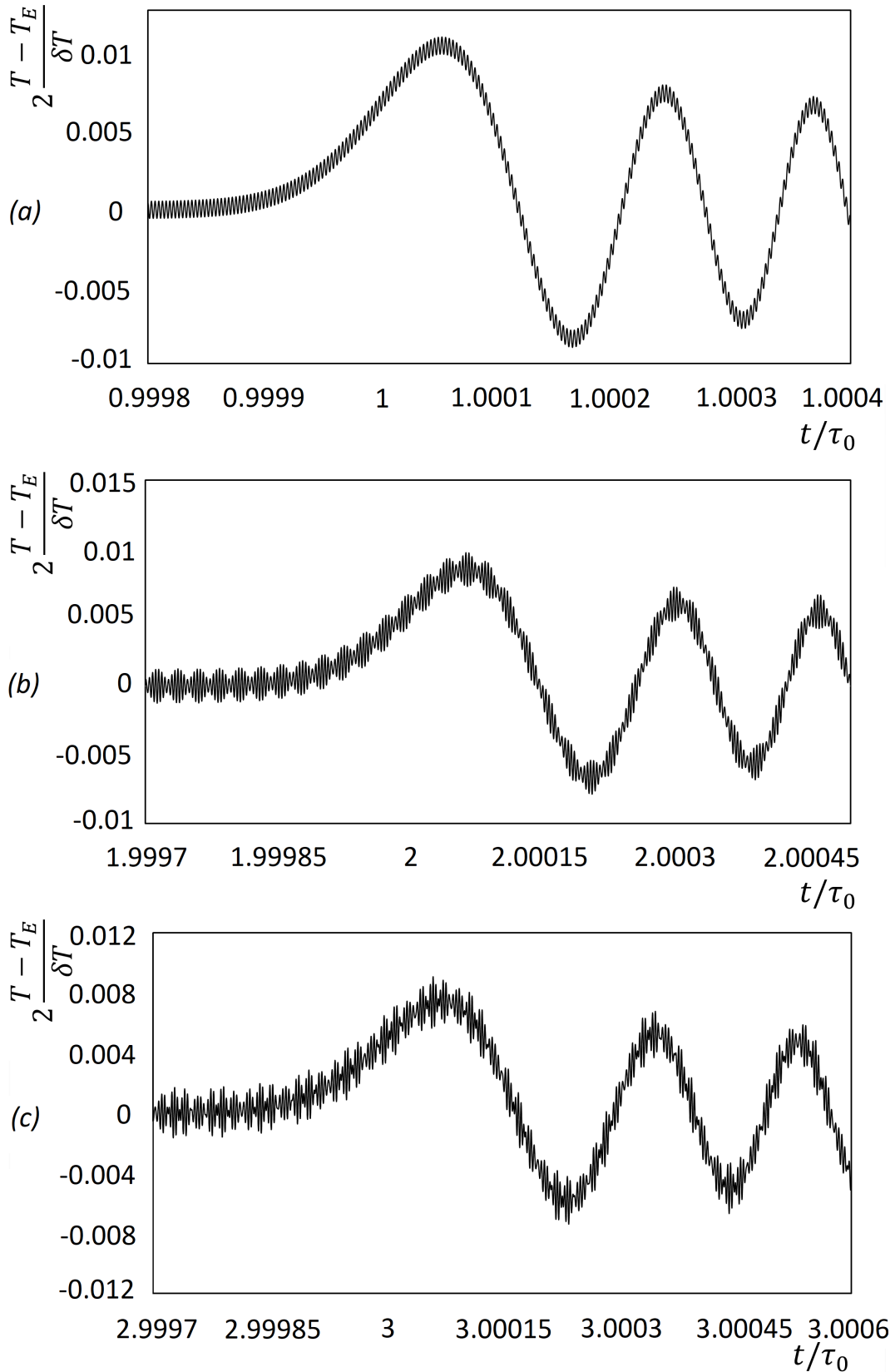


Рис. 2.2: Биения температуры, наложенные на три последовательных тепловых эхо-сигнала. Количество частиц $N = 10^6$, T_E — это равновесная температура, $\delta T = \Delta T \left(1 + \frac{1}{N-1}\right)$, ΔT — температурный скачок кристалла, вызванный тепловым возмущением, t — время, τ_0 — период реализации теплового эха.

Колебания температуры в кристалле, содержащем 10^6 частиц, показаны на рис. 2.2. Графики демонстрируют временную окрестность первого, второго и третьего теплового эха. Первое тепловое эхо инициируется для $t \approx \tau_0$. Соответствующие колебания температуры (2.30) описываются первой тепловой модой T_1 .

Каждая тепловая мода представлена соответствующей функцией Бесселя. Функции Бесселя не являются периодическими, однако удобно рассмотреть квазипериод — интервал между двумя последовательными максимумами функции Бесселя. Этот квазипериод не является константой, его значение уменьшается для каждого следующего максимума.

Как видно из Рис. 2.2 (а), температурные колебания для $t \rightarrow \tau_0$ — это суперпозиция (2.25) основной моды T_B (небольшие короткопериодичные колебания на графе) и первой моды T_1 (длиннопериодичные колебания на графике). Для $t \approx \tau_0$ квазипериод основной моды намного меньше, чем квазипериод первой моды. Чем крупнее кристалл, тем значительнее расхождение. Для времён $t \approx 2\tau_0$ параметры колебаний основной и первой тепловых мод сближаются, что приводит к биениям. Для $t \approx 2\tau_0$ реализуется второе тепловое эхо, с наложенными упомянутыми биениями — см. Рис. 2.2 (b). Для $t \approx 3\tau_0$ реализуется третье тепловое эхо (см. рис. 2.2 (c)). Численные эксперименты показывают, что для больших времен многократные реализации теплового эха приводят к все более сложной форме биений. Реализации теплового эха с большими порядковыми номерами менее выражены на фоне остаточных колебаний от предыдущих реализаций теплового эха. В результате при больших временах колебания температуры приобретают квазистохастический характер, напоминающий тепловой шум.

На рис. 2.3 показано сравнение аналитического решения (внизу) и компьютерное моделирование динамики частиц кристалла (вверху). Рассматриваемый кристалл содержит 10^3 частиц. Аналитическое решение описывается формулой (2.16) или (2.25). Компьютерное моделирование выполнено с использова-

нием метод центральных разностей для численного решения системы 10^3 дифференциальных уравнений динамики кристаллической цепочки (1.6) с шагом интегрирования $0.02/\omega_e$. Итоговый результат получен осреднением по 100 реализациям и по всем частицам одинаковых кристаллических цепочек. Начальные характеристики системы. Как видно из рис. 2.3 графики компьютерного моделирования и аналитического решения практически идентичны.

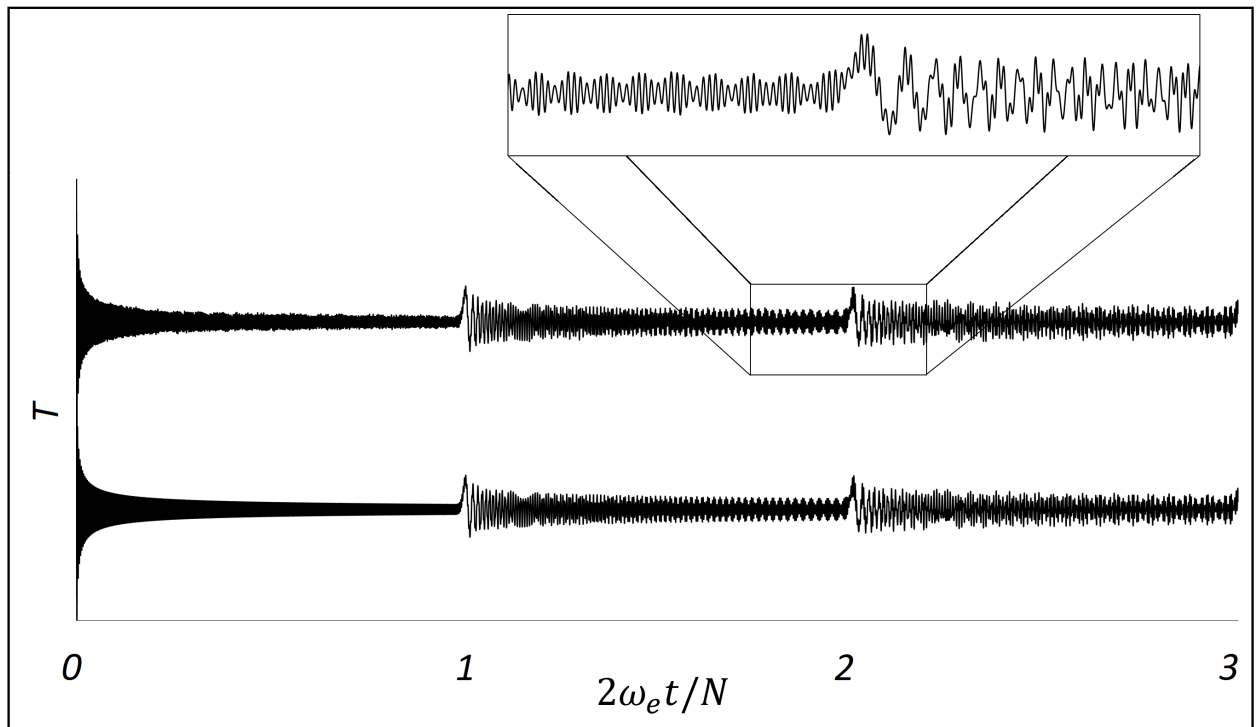


Рис. 2.3: Колебания кинетической температуры T в конечном кристалле. Численные (вверху) и аналитические (внизу) решения. Усреднение проводится с использованием 100 численных экспериментов. Число частиц $N = 10^3$, t - время, а ω_e — элементарная частота.

2.4.3 Асимптотики

Выражение (2.25), которое описывает колебания температуры в кристалле, включает функции Бесселя кратных порядков. Асимптотика для функций Бесселя больших порядков μ и произвольного аргумента x представлена математическим рядом, даваемым формулой 9.3.35 из [1]. Первый член этого выражения может быть представлен в виде следующего выражения:

$$J_\mu(x) \simeq \left(\frac{4\zeta}{1-\xi^2} \right)^{1/4} \frac{\text{Ai}(\mu^{2/3}\zeta)}{\mu^{1/3}}, \mu \rightarrow \infty, \quad (2.31)$$

где

$$\xi = \frac{x}{\mu},$$

$$\zeta = \begin{cases} \left(\frac{3}{2} \right)^{2/3} \left[\ln \left(\frac{1 + \sqrt{1-\xi^2}}{\xi} \right) - \sqrt{1-\xi^2} \right]^{2/3}, & \text{если } 0 \leq \xi \leq 1; \\ - \left(\frac{3}{2} \right)^{2/3} \left[\sqrt{\xi^2-1} - \text{arcsec } \xi \right]^{2/3}, & \text{если } \xi \geq 1, \end{cases}$$

и Ai — функция Эйри [1]:

$$\text{Ai}(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \cos \left(\frac{t^3}{3} + xt \right) dt \quad (2.32)$$

Заметим, что в отличие от формулы 9.3.35 [1] представление (2.31) непрерывно во всей области определения.

В случае $\xi \rightarrow 1$, что соответствует временной области появления теплового эха, можно использовать следующее асимптотическое представление функций Бесселя [1]:

$$J_\mu(x) = \left(\frac{2}{\mu} \right)^{1/3} \text{Ai} \left(\left(\frac{2}{\mu} \right)^{1/3} (\mu - x) \right) + O(\mu^{-1}), \quad (2.33)$$

которое получается из (2.31) с использованием приближения $\zeta \approx 2^{1/3}(\xi - 1)$. Представление (2.33) дается формулой 9.3.23 [1], которая справедлива для

$$|\mu - x|/\sqrt[3]{\mu} \leq A, \quad (2.34)$$

где A — произвольная положительная постоянная, что эквивалентно $x \approx \mu \gg 1$.

Важным преимуществом этих асимптотических представлений является то, что они выражают специальную функцию $J_\mu(x)$ двух переменных x , μ в терминах специальной функции Эйри одной переменной. Поэтому каждая тепловая мода (2.30), кроме базовой моды, может быть получена из функции Эйри путем линейного преобразования. Подстановка $\mu = 2pN$ и $x = 4\omega_e t$ в (2.33) позволяет получить асимптотику теплового эха.

График функции Эйри $\text{Ai}(-z)$ показан на рис. 2.4. На графике демонстрируется форма теплового эха в термодинамическом пределе ($N \rightarrow \infty$), где значение $z = 0$ соответствует опорному времени $t = \tau_0$ теплового эха с номером p .

Неожидан тот факт, что температура начинает увеличиваться до отчётного момента времени, то есть до того, как длинные волны от начального возмущения формально встретиться друг с другом. Вероятно, это связано с природой дискретных систем, где энергия может передаваться быстрее, чем скорость звука соответствующей континуальной системы.

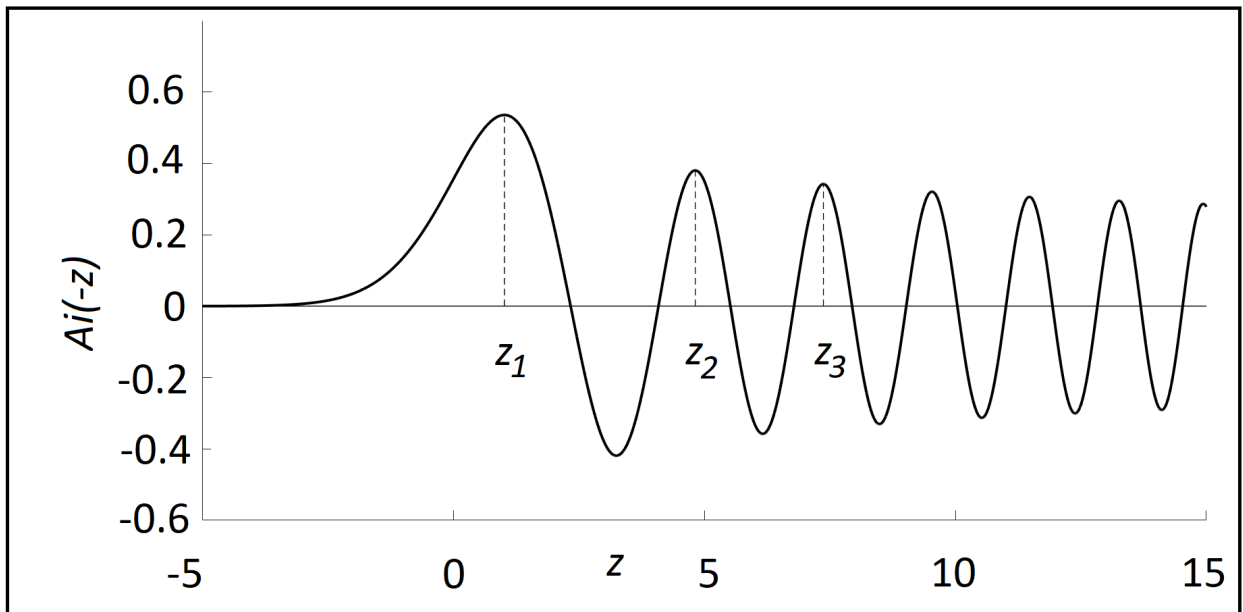


Рис. 2.4: Функция Эйри. Такая форма принимает любое тепловое эхо для достаточно большого количества частиц N .

Температура (2.25) может быть представлена в следующем виде:

$$T \approx T_E + \frac{\delta T}{2} J_0(4\omega_e t) + \delta T \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{\sqrt[3]{pN}} \text{Ai}\left(\frac{2pN - 4\omega_e t}{\sqrt[3]{pN}}\right). \quad (2.35)$$

Для больших значений аргументов $x \gg \mu + 1$ выполняется следующая асимптотика для функций Бесселя [1]:

$$J_{\mu}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos\left(x - \frac{\pi\mu}{2} - \frac{\pi}{4}\right) + O(x^{-3/2}). \quad (2.36)$$

Асимптотические представления (2.31) и (2.36) для функций Бесселя позволяют получить основные характеристики температурных колебаний при больших значениях количества частиц N .

2.4.4 Характеристики теплового эха

Рассмотрим тепловую моду с номером p для больших значений N :

$$T_p = \nu_p \delta T J_{2pN}(4\omega_e t), \quad (2.37)$$

где $\nu_p = \frac{1}{2}$ для $p = 0$ (базовая тепловая мода) и $\nu_p = 1$ в противном случае.

В непосредственной близости от опорного времени $t = p\tau_0$ тепловая мода T_p с использованием асимптотики (2.31) может быть представлена как

$$T_p \simeq \frac{\nu_p \delta T}{\sqrt[3]{pN}} \text{Ai}\left(\frac{2pN - 4\omega_e t}{\sqrt[3]{pN}}\right). \quad (2.38)$$

Функция Эйри $\text{Ai}(-z)$ изображена на рис. 2.4. Пусть z_k — последовательные точки локальных максимумов этой функции, где $k = 1, 2, 3, \dots$ — номер точки; $A_k = \text{Ai}(-z_k)$ — соответствующие максимумы функции Эйри. Первые три значения констант z_k и A_k приводятся ниже [24]:

$$\begin{aligned} z_1 &\approx 1.0 : & A_1 &\approx 0.53, \\ z_2 &\approx 4.8 : & A_2 &\approx 0.38, \\ z_3 &\approx 7.4 : & A_3 &\approx 0.34. \end{aligned} \quad (2.39)$$

Тогда соответствующие значения времени t_p первых локальных максимумов и значений максимумов M_p тепловой моды T_p (2.38) даются следующими формулами

$$t_p \simeq \frac{1}{4\omega_e} \left(2pN + \sqrt[3]{pN}\right), \quad M_p \simeq \frac{\nu_p \delta T}{\sqrt[3]{pN}} A_1. \quad (2.40)$$

Формула для t_p может быть переписана в виде

$$t_p \simeq p\tau_0 \left(1 + \frac{1}{2(pN)^{2/3}} \right). \quad (2.41)$$

Следовательно, относительная разница между опорным временем и временем максимума температуры t_p уменьшается с увеличением N , что доказывает, что эти времена совпадают в термодинамическом пределе.

В непосредственной близости от опорного времени $t = p\tau_0$ предыдущий тепловая мода T_{p-1} (2.37) с использованием асимптотики (2.36) может быть представлена как

$$T_{p-1} \simeq (-1)^N \nu_{p-1} \frac{\delta T}{\sqrt{\pi N p}} \cos \left(4\omega_e t - \pi N p - \frac{\pi}{4} \right). \quad (2.42)$$

Определим относительную высоту теплового эха h_p как отношение максимального значения тепловой моды с номером p (2.40) к амплитуде остаточных колебаний от предыдущей тепловой моды (2.42):

$$h_p \simeq \frac{\sqrt{\pi} A_1 \sqrt[6]{pN}}{\nu_{p-1}}. \quad (2.43)$$

Для $p = 1$ предыдущая мода — это мода T_B с вдвое меньшей амплитудой, чем амплитуда моды T_1 — (см. формулу 2.30).

Согласно формуле (2.43), относительная высота теплового эха h_p увеличивается с ростом N . Поэтому для очень больших N остаточные колебания можно считать незначительными. Однако это увеличение очень медленное — оно пропорционально $N^{1/6}$, поэтому даже при $N = 10^6$ остаточные колебания весьма заметны.

Для анализа свойств теплового эха введем его относительную ширину квазипериода w_k как отношение квазипериода соответствующей функции Бесселя к асимптотическому периоду функции Бесселя на бесконечности. Из формул (2.33)-(2.36) следует, что относительная ширина w_k пропорциональна $N^{1/3}$. Действительно, обозначим через $\{x_k\}$ множество точек, в которых функция Бесселя $J_\mu(x)$ имеет локальные максимумы (x_1 - первый локальный максимум, x_2 - второй и т.д.). Приближенные значения x_k находятся из условия, что аргумент

функции Эйри в выражении (2.33) равен значениям $-z_k$ (2.39):

$$x_k \approx \mu + z_k \left(\frac{\mu}{2}\right)^{1/3}, \quad J_\mu(x_k) \approx \left(\frac{\mu}{2}\right)^{-1/3} \text{Ai}(-z_k). \quad (2.44)$$

Как видно из формулы (2.36) значение асимптотического периода функции Бесселя составляет 2π . Тогда выражение для продолжительности теплового эха становится:

$$w_k \stackrel{\text{def}}{=} \frac{x_{k+1} - x_k}{2\pi} \approx \frac{z_{k+1} - z_k}{2\pi} \left(\frac{\mu}{2}\right)^{1/3} = \frac{z_{k+1} - z_k}{2\pi} \sqrt[3]{pN}. \quad (2.45)$$

Из соотношений (2.43) и (2.45) следует, что для больших N остаточные колебания от предыдущего теплового эха являются небольшими и частыми по сравнению с текущей волной теплового эха — см. Рис. 2.2.

2.4.5 Пример

Одним из примеров гармонической цепочки являются линейные цепочки ртути в вещество $\text{Hg}_{3-\delta}\text{AsF}_6$ [44]. При комнатной температуре рассеяние нейтронов и рентгеновских лучей показывает, что ионы ртути образуют одномерные цепочки, внутри решетки AsF_6 . Поскольку расстояние $\text{Hg} - \text{Hg}$ несоизмеримо с постоянной решетки основного кристалла AsF_6 , эти цепочки Hg являются одномерными объектами, практически без корреляций между соседними цепочками [41, 107]. Кроме того, этот эффект подтверждается большим расстоянием между цепями, а также сильным экранированием решетки-хозяина.

В связи с этим, в качестве демонстрации явления теплового эха рассмотрим цепочку из $N = 10^3$ атомов ртути с периодическими граничными условиями и начальной температурой $T_0 = 0^\circ\text{C}$. Тепловое возмущение мгновенно повышает температуру до значения

$$T_0 + \Delta T = 100^\circ\text{C}. \quad (2.46)$$

Выбранное значение ΔT достаточно мало по сравнению с температурой плавления углерода (3500°C), чтобы не учитывать нелинейность межатомного взаимодействия. В результате этого возмущения в кристалле реализуются колебания температуры вблизи равновесного значения $T_E \approx 50^\circ\text{C}$. График колебаний

температуры для кристалла, рассчитанный с использованием числового и аналитического решения, показан на Рис. 2.3. Формула (2.40) дает максимальное значение первого тепловой моды

$$M_1 \approx 5.3^\circ\text{C} \quad \Longrightarrow \quad T_E + M_1 \approx 55.3^\circ\text{C}. \quad (2.47)$$

Таким образом, тепловое эхо приносит составляет 10% изменения температуры по сравнению с первоначальным повышением температуры $T_E - T_0 \approx 50^\circ\text{C}$

Эти результаты слегка возмущены остаточными колебаниями от предыдущего (базовой) тепловой моды. Формулы (2.43) и (2.45) дают

$$h_1 \approx 5.9, \quad w_1 \approx 11.3, \quad (2.48)$$

следовательно, остаточные колебания примерно в 6 раз слабее и имеют в 11 раз более короткий период, чем колебания, вызванные первым тепловым эхом. Остаточные колебания в соответствии с формулой (2.42) имеют амплитуду приблизительно 0.9°C , что составляет 17% от значения M_1 . Если учесть остаточные колебания, максимальная температура, достигаемая первым тепловым эхом, составляет приблизительно 56.2°C .

Указанные характеристики зависят только от числа частиц N , а период реализации теплового эха τ_0 зависит от физических свойств кристалла и типа колебаний (продольных или поперечных). Рассмотрим продольные колебания. Скорость звука в цепи атомов ртути равна $c_s = 6.6 \times 10^5$ см/сек, межатомное расстояние в цепи ртути $a_{Hg} = 2.66 \text{ \AA}$ [44], отсюда $\omega_e = 2.48 \cdot 10^{13}$ сек. $^{-1}$. Тогда формула (2.29) дает $\tau_0 = 2.01 \cdot 10^{-11}$ сек, что в $\frac{N}{4\pi} \approx 80$ раз больше, чем период колебаний атома (см. рис. 2.5).

Полученные численные характеристики теплового эха могут быть использованы для определения его возникновения в физических экспериментах.

2.5 Заключение к главе 2

В настоящей главе рассматривался конечный одномерный гармонический кристалл, подверженный мгновенному пространственно-однородному тепловому воз-

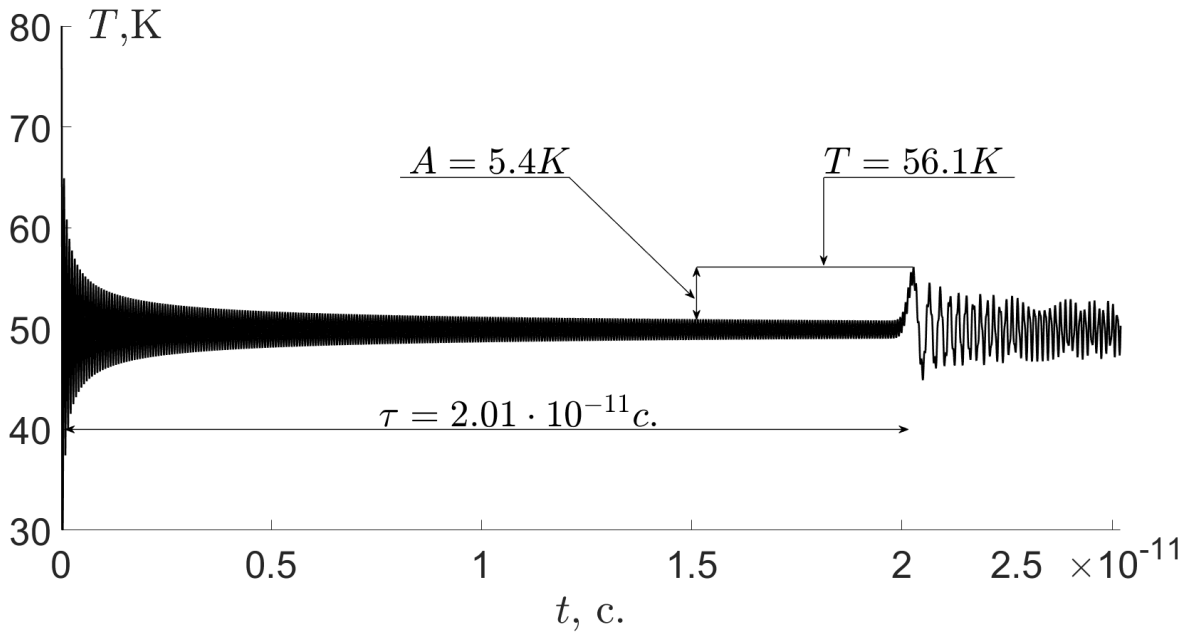


Рис. 2.5: Первое тепловое эхо, $N = 1000$, $C = 1824$ Н/м, $\Delta T = 100$

мушению. Численный и аналитический анализ, представленный в главе, демонстрирует явление теплового эха: резкое кратковременное повышение температуры, периодически реализующееся в конечных кристаллах после начального теплового возмущения.

Предыдущие работы [62, 75] показали, что в бесконечном одномерном гармоническом кристалле мгновенное тепловое возмущение вызывает тепловые колебания с монотонно убывающей амплитудой, эти колебания описываются функцией Бесселя нулевого порядка. В настоящей работе показано, что в конечном гармоническом кристалле последовательность реализаций теплового эха описывается бесконечным рядом функций Бесселя кратных порядков. Каждое тепловое эхо в термодинамическом пределе описывается функцией Эйри, а суперпозиция температурных колебаний, генерируемых последовательными реализациями теплового эха, приводит к биениям температуры. Каждое последующее тепловое эхо усложняет форму биений.

Таким образом, из анализа следует, что максимальное повышение температуры, вызванное тепловым эхо, уменьшается как $\sqrt[3]{pN}$ (2.40), где p — номер теплового эха, а N — количество частиц в кристалле. Длительность теплового эха увеличивается по тому же закону (2.45).

Между любыми двумя реализациями теплового эха амплитуда колебаний температуры уменьшается пропорционально квадратному корню времени (2.36). Чем больше кристалл, тем больше повышение температуры и тем заметнее остаточные колебания (2.43).

Таким образом, приведено аналитическое описание теплового эха для одномерных кристаллов. Представленные результаты могут быть обобщены для двумерных и трехмерных случаев с использованием методики, представленной в работах [77, 80]. Подобные эффекты можно обнаружить в нанотрубках, где ожидается реализация двух тепловых эха. Первое эхо вызвано распространением упругих волн вдоль направления нанотрубки, а второе эхо — в поперечном направлении. Влияние ангармонических эффектов на подобные тепловые процессы численно изучено в [80]. Исследование показывает, что гармоническая аппроксимация является достаточно точной в случае малой нелинейности.

Это явление является важной особенностью тепловых процессов в конечных системах и должно учитываться при разработке современных микро- и наноразмерных электронных устройств.

Глава 3

Переход к энергетическому равновесию при мгновенной нагрузке

Какие научные законы
гарантируют, что должны
существовать научные законы?

Мартин Гарднер

Настоящая глава посвящена описанию переходного процесса к состоянию равновесия в бесконечной цепочке частиц. Первоначально частицы имеют случайные смещения и случайные скорости, соответствующие равномерному начальному распределению температуры. Мгновенное изменение параметров цепочки инициирует переходный процесс. Аналитические выражения для температуры цепи как функции времени получены из статистического анализа динамических уравнений. Показано, что переходный процесс, также, как и в случае с тепловым возмущением, является колебательным и немонотонно сходится к новому состоянию равновесия. Такое поведение обычно неожиданно для тепловых процессов. Аналитические результаты дополняются численным моделированием.

3.1 Введение

В настоящей главе исследуется адиабатический неравновесный процесс, аналогичный рассмотренным ранее [8, 29, 77, 80, 88, 105]. Однако этот процесс инициируется мгновенной нагрузкой вместо мгновенного нагрева. Материал деформируется силами, равномерно распределенными по длине образца [87, 119],

поэтому в этом случае порядки скоростей механических и тепловых процессов одинаковы. Отметим, что в этой статье мы пренебрегаем эффектами инерции при нагрузке кристалла. Взаимодействие между механическими и тепловыми процессами требует учета нелинейности, поэтому рассматривается одномерный кристалл α -ФПУ [10, 26, 71]. Считается, что нелинейность достаточно сильна, чтобы вызвать адиабатический нагрев кристалла, но также достаточно слаба, чтобы анализировать возникающие колебания энергии в рамках гармонического приближения.

Глава организована следующим образом: В разделе 3.2 представлена математическая постановка задачи. Затем решаются две задачи, первая из которых — это определение равновесного значения кинетической температуры после нагрузки при больших временах $t \rightarrow \infty$ (раздел 3.3). Вторая задача, которой посвящена данная глава — это аналитическое описание перехода к новому состоянию равновесия (раздел 3.4). Показано, что колебания температуры кристалла во время переходного процесса описываются функцией Бесселя. Затем аналитическое решение сравнивается с численным. Раздел 3.5 посвящён оценке величины скачка температуры для реального кристалла.

3.2 Формулировка задачи

Рассмотрим модель бесконечного одномерного кристалла — цепочку точечных масс, соединенных безмассовыми пружинами. Предполагается, что частицы цепочки взаимодействуют только со своими ближайшими соседями. Подробное описание этой модели дано в главе 1. Термодинамические равновесные скорости частиц v_n и деформации связей ε_n являются независимыми стохастическими величинами, и все статистические характеристики кристалла постоянны во времени. Как и ранее, для описания статистического поведения системы вводятся следующие величины :

$$K \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2}m\langle \tilde{v}_n^2 \rangle, \quad T \stackrel{\text{def}}{=} \frac{2K}{k_B}, \quad (3.1)$$

де K — математическое ожидание кинетической энергии, T — кинетическая температура, $n = 1, 2, 3, \dots$ — индекс частицы, $\langle \dots \rangle$ — оператор для математического ожидания, \tilde{v}_n — центрированная скорость частицы, k_B — постоянная Больцмана, и m — масса частицы. Статистические характеристики этой системы зависят от таких параметров кристалла, как масса частицы и жёсткость связи. Вариация этих параметров переводит кристалл в неравновесное состояние и инициирует переходный процесс, который в конечном итоге переводит кристалл в новое состояние равновесия.

Одним из естественных способов изменения жёсткости связи кристалла является однородная деформация кристалла внешней нагрузкой. Например, такое нагружение может быть реализовано путём приложения распределённых электромагнитных сил к кольцевому образцу [87, 119]. На основе подхода, описанного в [62] и в главе 1 исследуется эволюция кинетической температуры кристалла во время этого переходного процесса.

В дополнение к математическому ожиданию кинетической энергии K , будем использовать математическое ожидание потенциальной энергии U :

$$\begin{aligned} U(\epsilon + \varepsilon_n) &\stackrel{\text{def}}{=} \langle \Pi(\epsilon + \varepsilon_n) \rangle, & \varepsilon_n &\stackrel{\text{def}}{=} \tilde{u}_n - \tilde{u}_{n-1}, \\ \Pi(\varepsilon) &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{C}{2}\varepsilon^2 + \frac{\alpha}{3}\varepsilon^3, \end{aligned} \quad (3.2)$$

где Π — межчастичный потенциал, C и α — жесткости межчастичных связей первого и второго порядка, \tilde{u}_n — центрированное перемещение частицы, и деформация — это сумма однородной деформации ϵ и стохастической деформации ε_n . Обратим внимание на то, что потенциальная энергия содержит кубический член в отличие от гармонического приближения. Однородная деформация $\epsilon(t)$ прикладывается мгновенно:

$$\epsilon(t) = \begin{cases} 0, & t < 0 \\ \epsilon, & t \geq 0, \end{cases} \quad (3.3)$$

где ϵ — константа. Сила F_n , действующая на частицу $n - 1$ со стороны частицы n , равна

$$F_n \stackrel{\text{def}}{=} -F(\epsilon + \varepsilon_n), \quad F(\varepsilon) = -\Pi'(\varepsilon) = -C\varepsilon - \alpha\varepsilon^2, \quad (3.4)$$

где штрих означает дифференцирование. Уравнение динамики частицы для кристалла имеет вид

$$m\dot{v}_n = F_{n+1} - F_n. \quad (3.5)$$

Ниже рассматриваем случай слабой нелинейности, что значит, что вторые члены в формулах для $\Pi(\varepsilon)$ (3.2) и $F(\varepsilon)$ (3.4) малы по сравнению с первыми. Поскольку нелинейный член слабый, гармоническое (линейное) приближение может быть использовано для описания тепловых процессов. В пользу этого говорит то, что при относительно малых временах гармоническое приближение довольно точно описывает тепловые процессы в кристалле со слабой нелинейностью [71, 80, 81]. Однако ненулевой кубический член в потенциале позволяет учесть влияние однородной деформации ε на межчастичный потенциал $\Pi(\varepsilon)$, тем самым перевязав тепловые и механические процессы.

Аналитическое выражение для кинетической температуры на больших временах после однородной деформации может быть получено с использованием теоремы о вириале и приведено в следующем разделе.

3.3 Кристалл в тепловом равновесии

В настоящем разделе с использованием вириального соотношения даются выражения для кинетической температуры кристалла перед мгновенным нагружением и выражение для асимптотического значения кинетической температуры на больших временах после приложения нагружения.

3.3.1 Вириальное соотношение

В данном подразделе представлен вывод вириального соотношения для математического ожидания кинетической энергии. Для этого, следуя [61, 124] воспользуемся тождеством для дисперсии скоростей:

$$\langle \tilde{v}_k^2 \rangle = \langle \dot{\tilde{u}}_k^2 \rangle = \langle (\tilde{u}_k \dot{\tilde{u}}_k) \rangle - \langle \tilde{u}_k \ddot{\tilde{u}}_k \rangle = \langle (\tilde{u}_k \tilde{v}_k) \rangle - \langle \tilde{u}_k \dot{\tilde{v}}_k \rangle. \quad (3.6)$$

Следуя [61] и используя уравнения динамики кинетической энергии (3.1) системы может быть представлена в следующем виде:

$$K = \frac{m}{2} \langle \tilde{u}_k \tilde{v}_k \rangle - \frac{1}{2} \langle \tilde{u}_k \Delta F_k \rangle, \quad (3.7)$$

Второе слагаемое выражения (3.7), с использованием определения перемещений u_k запишется в виде

$$\begin{aligned} \langle u_k \Delta F_k \rangle &= \langle F_{k+1} u_k \rangle - \langle F_k u_k \rangle = \\ &= \langle F_{k+1} u_k \rangle - \langle F_k u_k \rangle + \langle F_k u_{k-1} \rangle - \langle F_k u_{k-1} \rangle \\ &= -\langle \varepsilon_k F_k \rangle + \langle F_{k+1} u_k \rangle - \langle F_k u_{k-1} \rangle. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Определим функцию

$$g \stackrel{\text{def}}{=} \langle F_k u_{k-1} \rangle, \quad \langle F_{k+1} u_k \rangle \approx g + g', \quad (3.9)$$

Величины g и $\langle u_n v_n \rangle$ постоянны в состоянии термодинамического равновесия, а их производные равны нулю. Поэтому выражение для кинетической энергии имеет вид

$$K = \frac{1}{2} \langle \varepsilon_n F_n \rangle. \quad (3.10)$$

Формула (3.10) позволяет получить выражения для равновесной кинетической температуры кристалла до и после мгновенной деформации.

3.3.2 До деформации

В настоящем подразделе с помощью вириального соотношения (3.10) получено выражение связывающее кинетическую температуру и дисперсии деформаций и скоростей, определяющие характеристики статистических процессов в кристалле. При $t < 0$ кристалл считается находящимся в состоянии термодинамического равновесия и согласно (3.3) имеем для энергий:

$$K = \frac{1}{2} m \langle v_n^2 \rangle, \quad U = \frac{C}{2} \langle \varepsilon_n^2 \rangle + \frac{\alpha}{3} \langle \varepsilon_n^3 \rangle \quad (3.11)$$

Сравнение выражений (3.10) и (3.11), а также подстановка выражения для силы, действующей на частицу (3.4), в случае нулевой однородной деформации ε

в выражение (3.10) даёт следующее:

$$m\langle v_n^2 \rangle = \langle \varepsilon_n F_n \rangle = C\langle \varepsilon_n^2 \rangle + \alpha\langle \varepsilon_n^3 \rangle, \quad (3.12)$$

где использовано, что энергии кристалла в состоянии равновесия равны. Пренебрегая малым членом $\alpha\langle \varepsilon_n^3 \rangle$ в уравнении (3.12) получим, что кинетическая температура кристалла перед нагрузкой определяется следующей формулой:

$$k_B T_0 = m\langle v_n^2 \rangle = C\langle \varepsilon_n^2 \rangle. \quad (3.13)$$

Из выражения (3.13) можно увидеть, что кинетическая температура пропорциональна потенциальной энергии кристалла (3.11) в случае малых деформаций в начальный момент времени.

В следующем подразделе рассматривается кинетическая температура после мгновенной деформации.

3.3.3 После деформации

Для $t \geq 0$, кинетическая и потенциальная энергии кристалла равны

$$\begin{aligned} K &= \frac{1}{2}m\langle v_n^2 \rangle, & U &= \Pi(\epsilon) + U_T, \\ U_T &= \frac{1}{2}(C + 2\alpha\epsilon)\langle \varepsilon_n^2 \rangle + \frac{1}{3}\alpha\langle \varepsilon_n^3 \rangle, \end{aligned} \quad (3.14)$$

где U_T — тепловая часть потенциальной энергии. Как видно из выражения (3.14) тепловая часть потенциальной энергии определяется через стохастические деформации, в то время как, «холодная» часть потенциальной энергии, определяемая слагаемым $\Pi(\epsilon)$ зависит только от однородной деформации. Однородная деформация изменяет равновесные положения атомов — следовательно её влияние может интерпретироваться, как изменение жёсткости связей кристалла.

После переходного процесса, при достижении равновесия системы, когда все скорости частиц и деформации равны нулю, лишь «холодная» часть потенциальной энергии не равна нулю. Из этого следует, что во всех переходных процессах, величина $U_T + K$ при $t \geq 0$ постоянна и уравниваются лишь кинетическая энергия и тепловая часть потенциальной энергии. Заметим, что

полное выравнивание кинетической и потенциальной энергий реализуется лишь в гармонических кристаллах.

В формуле (3.14) член $\alpha\epsilon\langle\varepsilon_n^2\rangle$ соответствует по порядку величины члену $C\langle\varepsilon_n^2\rangle$. Однако чтобы оставаться в рамках гармонической теории, слагаемое $\alpha\langle\varepsilon_n^3\rangle$ ниже опускается. Слагаемое $\alpha\epsilon\langle\varepsilon_n^2\rangle$ позволяет описывать термоупругие эффекты. На больших временах, колебательный режим прекращается и система переходит в состояние равновесия. В этом состоянии следующие энергии равны: кинетическая энергия K и тепловая часть потенциальной энергии U_T . Выражение для кинетической температуры (3.1) может быть представлено в виде

$$k_B T|_{t \rightarrow \infty} = 2K = U_T + K. \quad (3.15)$$

Выражение для этой суммы можно получить, подставив в (3.15) начальные значения кинетической энергии и тепловой части потенциальной энергии:

$$k_B T = \frac{1}{2} m \langle v_n^2 \rangle \Big|_{t=0} + \frac{1}{2} (C + 2\alpha\epsilon) \langle \varepsilon_n^2 \rangle \Big|_{t=0}, \quad (3.16)$$

где кубический член $\alpha\langle\varepsilon_n^3\rangle/3$ опущен. Подстановка выражений (3.13) в (3.16) даёт:

$$T|_{t \rightarrow \infty} = \frac{T_0}{2} + \frac{T_0}{2} + T_0 \frac{\alpha\epsilon}{C} = T_0 \left(1 + \frac{\alpha\epsilon}{C} \right). \quad (3.17)$$

Из выражения (3.17) следует, что изменение кинетической температуры T в первом приближении пропорционально однородной деформации ϵ .

3.4 Динамика переходного процесса

В предыдущем разделе была найдена асимптотика кинетической температуры на больших временах. В этом разделе основное внимание уделяется поиску выражения для кинетической температуры как функции времени.

Подставляя выражение (3.4) в (3.5), мы получаем следующее уравнение движения:

$$m\dot{v}_n = C\Delta\varepsilon_n + 2\alpha\epsilon\Delta\Delta\varepsilon_n + \alpha\Delta\varepsilon_n^2, \quad \dot{\varepsilon}_n = \Delta v_n \stackrel{\text{def}}{=} v_n - v_{n-1}, \quad \Delta\varepsilon_n \stackrel{\text{def}}{=} \varepsilon_n - \varepsilon_{n-1}. \quad (3.18)$$

Членом $\alpha\Delta\varepsilon_n^2$ можно пренебречь в случае малых деформаций. Таким образом, уравнения (3.18) становятся линейными:

$$\dot{v}_n = \omega^2(\varepsilon_n - \varepsilon_{n-1}), \quad (3.19)$$

где $\omega \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\frac{C+2\alpha\epsilon}{m}}$. Обратим внимание, что сумма $C + 2\alpha\epsilon$ играет роль жесткости первого порядка после внешнего нагружения. Начальные условия для системы (3.19) определяются из уравнение (3.13):

$$v_n|_{t=0} = \sqrt{\frac{k_B T_0}{m}} \rho_n, \quad \varepsilon_n|_{t=0} = \sqrt{\frac{k_B T_0}{C}} \varrho_n, \quad (3.20)$$

где ρ_n и ϱ_n — независимые случайные величины с нулевым математическим ожиданием и единичной дисперсией:

$$\langle \rho_n \rho_{n+k} \rangle = \delta_k, \quad \langle \varrho_n \varrho_{n+k} \rangle = \delta_k. \quad (3.21)$$

Здесь $\delta_k = 1$ для $k = 0$ и $\delta_k = 0$ в противном случае. Уравнение (3.20) справедливо при предположении, что скорости частиц и деформации связей являются независимыми величинами при термодинамическом равновесии.

Начальная задача (3.19)-(3.20) описывает стохастическую динамику частиц. Кинетическая температура кристалла, как функция времени может быть затем найдена с использованием ковариационного анализа [30, 62], путём введения обобщённых энергии

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_k &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} m \langle v_n v_{n+k} \rangle, & \mathcal{U}_k &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} m \omega^2 \langle \varepsilon_n \varepsilon_{n+k} \rangle, \\ \mathcal{L}_k &\stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{K}_k - \mathcal{U}_k, \end{aligned} \quad (3.22)$$

где \mathcal{K}_k и \mathcal{U}_k — обобщенные кинетическая и потенциальная энергии, и \mathcal{L}_k — обобщенный лагранжиан. Дифференцирование уравнений (3.22) и уравнений дви-

жения (3.18) приводит к следующей задаче начального значения для обобщенного лагранжиана:

$$\begin{aligned} \ddot{\mathcal{L}}_k &= 4\omega^2(\mathcal{L}_{k-1} - 2\mathcal{L}_k + \mathcal{L}_{k+1}), \\ t = 0 : \quad \mathcal{L}_k &= -\frac{T_0 k_B \alpha \epsilon}{C} \delta_k, \quad \dot{\mathcal{L}}_k = 0. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Начальные условия в (3.23) находятся из уравнений (3.13) и (3.20). Решение аналогичной начальной задачи получено ранее в главе 1. Согласно этому решению обобщенный лагранжиан осциллирует с убывающей амплитудой:

$$\mathcal{L}_k = -\frac{T_0 k_B \alpha \epsilon}{C} J_{2k}(4\omega t), \quad (3.24)$$

где $J_k(x)$ — функция Бесселя k -го порядка [1].

Кинетическая энергия K и тепловая часть потенциальной энергии U_T равны обобщенным кинетической и потенциальной энергиям с нулевым индексом, поэтому кинетическая температура T может быть выражена следующим образом:

$$k_B T = \mathcal{L}_0 + K + U_T. \quad (3.25)$$

Кинетическая температура кристалла как функция времени может быть затем найдена с помощью формул (3.24)-(3.25):

$$T = -\frac{T_0 \alpha \epsilon}{C} J_0(4\omega t) + T_0 \left(1 + \frac{\alpha \epsilon}{C}\right) = T_0 + \frac{T_0 \alpha \epsilon}{C} \left(1 - J_0(4\omega t)\right). \quad (3.26)$$

Отметим, что согласно асимптотическому представлению для функции Бесселя [1],

$$\begin{aligned} x &\gg \mu + 1 : \\ J_\mu(x) &= \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos\left(x - \frac{\pi\mu}{2} - \frac{\pi}{4}\right) + O(x^{-3/2}), \end{aligned} \quad (3.27)$$

амплитуда колебаний кинетической температуры уменьшается пропорционально $t^{-1/2}$.

На рис. 3.1 показано сравнение аналитического решения (3.26) с численным решением, полученным с помощью компьютерное моделирование слабоангармонического кристалла, состоящего из $N = 5 \cdot 10^4$ частиц, при периодических

граничных условиях. В рамках численного эксперимента параметры рассматриваемой задачи выбираются так, чтобы $\alpha\epsilon/C = -0.1$. В моделировании используется метод центральных разностей с шагом интегрирования $0.01/\omega_e$. В начальный момент времени перемещения частиц равны нулю, в то время как скорости частиц случайны и соответствуют температуре кристалла $2T_0$. Процесс выравнивания энергии приводит к температуре кристалла, которая осциллирует с уменьшающейся амплитудой около значения T_0 . Нагрузка однородной деформацией происходит тогда, когда колебания температуры имеют пренебрежимо малую амплитуду. После нагружения кристалла температура претерпевает резкий скачок и осциллирует около нового равновесного значения.

В работе [80] было численно показано, что тепловые явления в кристаллах с достаточно слабой нелинейностью не сильно отличаются от таковых в гармонических кристаллах. Для моделирования выбран промежуток времени, достаточный для описания десятков температурных колебаний после того, как произведена однородная деформация. Однако временной интервал выбран не настолько большим, чтобы колебания температуры значительно отклонялись от гармонического решения. Чтобы вычислить математические ожидания для статистических величин, результаты усредняются по всем частицам и 10^3 реализациям, которые являются решениями одних и тех же уравнений с разными случайно сгенерированными начальными условиями. Согласно статье [62], температура кристалла перед мгновенной деформацией является функцией Бесселя нулевого порядка. Мгновенная деформация применяется, когда амплитуда колебаний температуры мала по сравнению с абсолютным значением $\alpha\epsilon/C$.

Как видно из рис. 3.1, аналитическое решение (3.26) практически совпадает с результатами численного интегрирования уравнения динамики цепочки уравнения (3.3) - (3.5) для нескольких десятков периодов колебаний.

Формула (3.17) дает предельное значение для кинетической температуры. Согласно выражению (3.25), после мгновенной деформации кинетическая температура колеблется около этого предельного значения и стремится к нему на

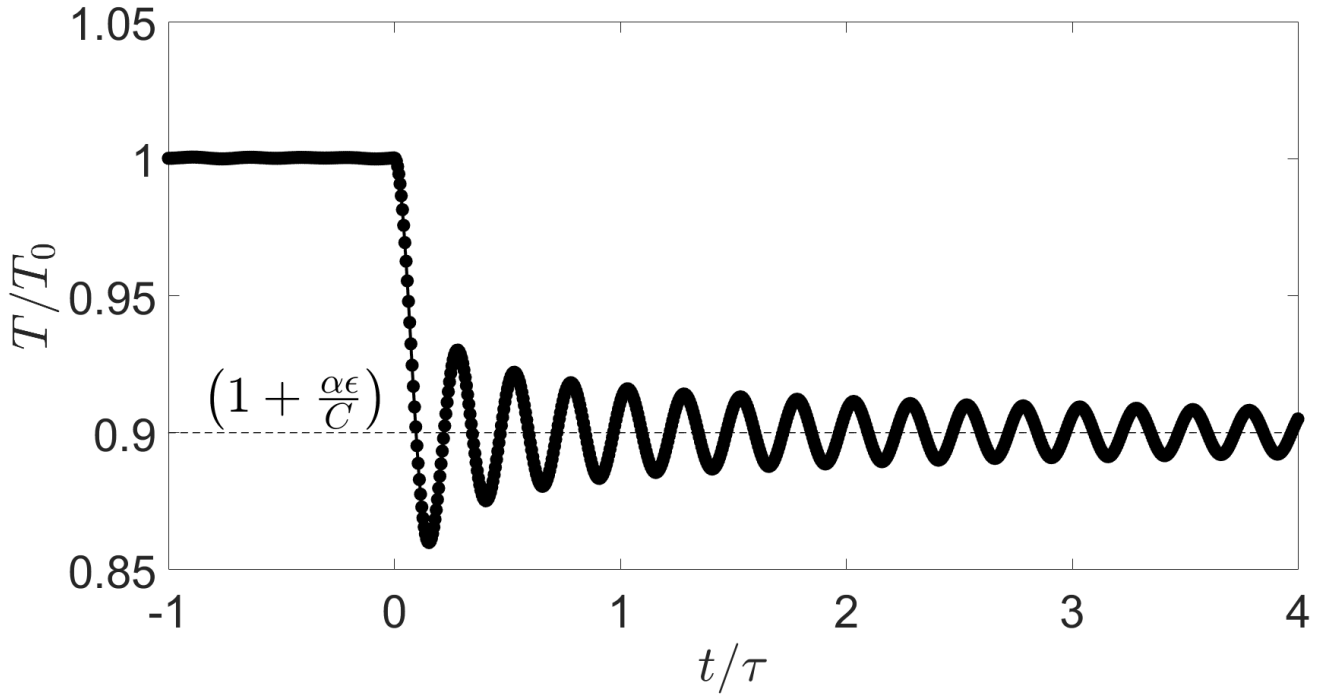


Рис. 3.1: На рисунке изображены колебания кинетической температуры T в бесконечном кристалле после мгновенной нагрузки при $t = 0$. Представлены численное (точки) и аналитическое (сплошная линия) решения. Усреднение проводится с помощью численных экспериментов 10^3 . Число частиц $N = 5 \cdot 10^4$, константа $\tau = 2\pi/\omega_e$, коэффициент $\alpha\epsilon/C = -0.1$.

больших временах. Таким образом, при $t \rightarrow \infty$, выражение (3.26) совпадает с формулой (3.17), полученной из теоремы вириала. Для произвольных времен это выражение дает желаемое описание неравновесного переходного процесса.

3.5 Пример

Чтобы оценить скачок температуры в переходном процессе, рассмотрим одномерное кольцо атомов углерода, которое находится в состоянии термодинамического равновесия с начальной температурой $T_0 = 300^\circ$ К. Предположим, что в результате однородного нагружения деформация связи составляет 1.0 % от равновесного межатомного расстояния $a = 0.154$ нм [13]. Масса атома углерода $m = 1,99 \cdot 10^{-26}$ кг, а коэффициент жесткости связи первого порядка принимается равным жесткости связи алмазов $C = 472$ Н/м [9]. Коэффициент жесткости

второго порядка можно найти по следующей формуле [65]:

$$\alpha = -\frac{\beta a C^2}{k_B}, \quad (3.28)$$

где $\beta = 0.7 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ — коэффициент теплового расширения алмаза [86]. Подстановка коэффициентов жесткости и значения однородной деформации в формулу (3.17) дают новое значение равновесной температуры 298.3 К. Асимптотический период колебаний кинетической температуры в переходном процессе, описываемый формулой (3.26), приблизительно равен 10.2 фемтосекунд. Таким образом, деформация равная 1.0 % приводит к изменению температуры кристалла на 0.6 %.

3.6 Заключение к главе 3

В настоящей главе был представлен аналитический подход к анализу переходного процесса в одномерных кристаллах (цепочках), подвергнутых мгновенной однородной деформации. Такую деформацию можно интерпретировать как мгновенное изменение жесткости межчастичных связей в цепи. Мгновенное изменение жесткости резко изменяет потенциальную энергию кристалла, что приводит к изменению кинетической энергии и кинетической температуры. Обнаружено, что переходный процесс сопровождается высокочастотными колебаниями энергии, которые имеют аналитическое представление в терминах функции Бесселя нулевого порядка, и следовательно, амплитуда переходных колебаний обратно пропорциональна квадратному корню из времени. После затухания колебаний система достигает почти равновесного состояния, соответствующего предсказаниям равновесной термодинамики. Однако переходный процесс может быть изучен подробно с использованием представленного подхода. Аналитическое решение подтверждается численным моделированием.

Используя, описанную в [77] технику, представленный подход может быть расширен для анализа переходных процессов в двумерных и трехмерных материалах. Полученные результаты важны для установления связи между меха-

ническими и тепловыми процессами в твердых телах в фемтосекундной шкале времени.

Глава 4

Диффузионные процессы

Мир прост. Все сложности от
нашего непонимания.

Антон Кривцов

4.1 Введение

Процессы, реализующиеся в гармонических системах, могут быть разделены на тепловые и диффузионные. Тепловые процессы ассоциируются с тепловым движением частиц, а именно с их скоростями, а диффузионные процессы связаны с перемещениями частиц. В настоящей главе рассматриваются быстрые диффузионные процессы. Хотя в рассматриваемой системе порядок частиц не изменяется, оказывается, что в переходном процессе частицы могут довольно далеко уходить от своего равновесного первоначального положения. Такое поведение может вызывать большие деформации в кристалле. Более того, является контринтуитивным, что по прошествии определённого времени, дисперсия перемещения частиц кристалла становится равной нулю — фактически кристалл приходит в своё начальное состояние. Подробное описание этого явления даётся ниже.

Также, как и прежде в настоящей главе исследуется модель одномерного кристалла, с периодическими граничными условиями и случайными начальными

ми условиями:

$$\begin{aligned} \ddot{u}_n &= \mathcal{L}u_n \stackrel{\text{def}}{=} \omega_e^2(u_{n-1} - 2u_n + u_{n+1}), \\ u_0 &= u_N, \quad u_{N+1} = u_1, \\ t = 0 : \quad u_n &= 0, \quad \dot{u}_n = \sigma \rho_n, \end{aligned} \tag{4.1}$$

где ρ_n — случайные величины с нулевым математическим ожиданием и единичной дисперсией, σ — дисперсия начальных скоростей частиц.

Одной из самых важных характеристик системы, является лагранжиан \mathbb{L} , представляющий собой разность математических ожиданий кинетической и потенциальной энергий системы. Удобным представляется использование приведённого лагранжиана λ_k , который при $k = 0$ пропорционален лагранжиану системы $\lambda_0 \sim \frac{2}{m}\mathbb{L}$ [62] (в данном случае, под лагранжианом системы понимается усреднённый по количеству частиц лагранжиан). Приведём ниже некоторые необходимые формулы, необходимые для анализа термомеханических характеристик кристалла и найдены формулы для λ_0 и L .

Дифференциальные уравнения с соответствующими начальными условиями и их решения, дающие связь между приведённым лагранжианом системы λ_k , ковариациями скоростей $\kappa_k = \langle v_n v_{n+k} \rangle$ и перемещений $\xi_k = \langle u_n u_{n+k} \rangle$ частиц были найдены ранее (1.83):

$$\begin{aligned} \lambda_k &= \kappa_k + \mathcal{L}\xi_k, \quad \ddot{\lambda}_k = 4\mathcal{L}\lambda_k, \\ t = 0 : \quad \lambda_k &= \sigma^2 \delta_k^N, \quad \dot{\lambda}_k = 0, \end{aligned} \tag{4.2}$$

решение уравнения (4.2) имеет вид (см. формулы (1.88) и (1.89)):

$$\begin{aligned} \lambda_k &= \frac{\sigma^2}{N} \sum_{s=0}^{N-1} \cos q_s n \cos(2\Omega_s t), \quad q_s \stackrel{\text{def}}{=} \frac{2\pi s}{N}, \quad \Omega_s \stackrel{\text{def}}{=} 2\omega_e \sin \frac{\pi s}{N}, \\ 2\kappa_k &= \lambda_k + \sigma^2 \delta_k^N, \quad \ddot{\xi}_k = 2\lambda_k, \quad \xi_k|_{t=0} = 0, \quad \dot{\xi}_k|_{t=0} = 0. \end{aligned} \tag{4.3}$$

Обратим внимание, что в (4.3) выписаны формулы для приведённого лагранжиана нецентрированных величин λ_k . Определим приведённый лагранжиан для центрированных величин (центрированный приведённый лагранжиан):

$$\tilde{\lambda}_k \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{\kappa}_k + \mathcal{L}\tilde{\xi}_k. \tag{4.4}$$

В разделе 1 показано, что ковариации центрированных, материально объективных величин, можно вычислить как разность значений нецентрированных ковариаций и членов, независящих от ковариационного индекса k и являющихся характеристиками центра масс системы (см. формулы (1.75) и (1.81)). Таким образом получаем:

$$\tilde{\xi}_k = \xi_k - \frac{\sigma^2 t^2}{N}, \quad \tilde{\kappa}_k = \kappa_k - \frac{\sigma^2}{N}. \quad (4.5)$$

Подстановка выражений для κ_k и ξ_k из (4.3) в уравнения (4.5) при $k = 0$ даёт связь дисперсий квадратичных величин с приведённым лагранжианом:

$$\langle \tilde{u}_n^2 \rangle = 2\mathcal{I}^2 \lambda(t) - \frac{\sigma^2 t^2}{N}, \quad \langle \tilde{v}_n^2 \rangle = \frac{\lambda(t)}{2} + \frac{\sigma^2}{2} - \frac{\sigma^2}{N}, \quad \lambda(t) \stackrel{\text{def}}{=} \lambda_0 \equiv \lambda_n \Big|_{n=0}. \quad (4.6)$$

где использован интегральный оператор

$$\mathcal{I}f(t) \stackrel{\text{def}}{=} \int_0^t f(\tau) d\tau. \quad (4.7)$$

Из формул (4.3) получаем выражение для приведённого лагранжиана нецентрированных величин:

$$\lambda(t) = \frac{\sigma^2}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \cos(2\Omega_k t), \quad (4.8)$$

а также связь центрированного приведённого лагранжиана с нецентрированным:

$$\tilde{\lambda}_k = \lambda_k - \frac{\sigma^2}{N}. \quad (4.9)$$

Отсюда же можно получить явные выражения для центрированных дисперсий скоростей и перемещений частиц:

$$\begin{aligned} \langle \tilde{v}_p^2 \rangle &= \frac{\sigma^2}{N} \sum_{k=1}^{N-1} \cos^2 \left(2\omega_e t \sin \frac{\pi k}{N} \right), \\ \langle \tilde{u}_p^2 \rangle &= \frac{\sigma^2}{N} \sum_{k=1}^{N-1} \frac{\sin^2(\Omega_k t)}{\Omega_k}, \quad \Omega_k \stackrel{\text{def}}{=} 2\omega_e t \sin \frac{\pi k}{N} \end{aligned} \quad (4.10)$$

Другой вывод этих формул приведён ранее в главе (1) (см. формулы (1.76) и (1.82)). Зависимость от времени как тепловых, так и диффузионных процессов, определяется аналитическими выражениями для дисперсий (4.10). С

одной стороны данные зависимости удобны для расчетов, когда N не очень велико. С другой стороны, при рассмотрении моделей кристаллов, приближенных к реальным по числу частиц N , эти выражения содержат большое количество равноправных слагаемых. Запись этих формул в терминах Бесселевых функций значительно облегчает анализ. Соответствующий вывод был проведён в главах 1 (для бесконечного одномерного кристалла) и 2 (для конечного одномерного кристалла). Для того, чтобы получить аналогичное выражение для лагранжиана воспользуемся тождеством для косинусов кратных углов:

$$\frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \cos \left(z \sin \frac{\pi k}{N} \right) = J_0(z) + 2 \sum_{p=1}^{\infty} J_{2pN}(z), \quad (4.11)$$

где $J_n(z)$ — функции Бесселя 1-го рода. Доказательство тождества (4.11) приведено в разделе 2 (см. формулу (2.24)). С использованием формулы (4.11) выражение (4.8) для приведённого лагранжиана λ приобретает вид

$$\lambda(t) = \left(J_0(4\omega_e t) + 2 \sum_{p=1}^{\infty} J_{2pN}(4\omega_e t) \right). \quad (4.12)$$

Подстановка (4.12) в (4.9) даёт выражение для лагранжиана системы \mathbb{L} :

$$\mathbb{L} = \frac{m}{2} \tilde{\lambda}(t) = \frac{m\sigma^2}{2} \left(J_0(4\omega_e t) + 2 \sum_{p=1}^{\infty} J_{2pN}(4\omega_e t) \right) - \frac{\sigma^2 m}{2N}, \quad \tilde{\lambda}(t) \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{\lambda}_0. \quad (4.13)$$

В следующем разделе производится анализ точных и асимптотических выражений для дисперсий перемещений и скоростей в случае бесконечного кристалла.

4.2 Дисперсии перемещений в бесконечном кристалле

Как уже ранее обсуждалось, значительно упростить анализ дисперсий перемещений позволяет использование функций Бесселя. Функции Бесселя практически равны нулю, если значение аргумента, значительно меньше значения порядка функции Бесселя. Лишь в некоторой, относительно малой, окрестности значения индекса, функция Бесселя существенно отлична от нуля. Для практических исследований в формуле (4.12) достаточно взять одно или несколько

слагаемых. Так как, при больших N наибольшие значения функция Бесселя принимает при аргументе, принимающие значения близкие к значению индекса. Этому соответствуют моменты времени

$$t_p = p\tau_0, \quad \tau_0 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{N}{2\omega_e}, \quad p = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (4.14)$$

где моменты t_p называются опорным временем, а величина τ_0 — квазипериодом. В окрестности опорных моментов времени в сумме (4.12) доминирует одно основное слагаемое, а остальные вносят лишь незначительный вклад (см. формулу (2.43)).

Пользуясь вышесказанным проанализируем диффузионные процессы. Именно в моменты времени $p\tau_0$, где p — целые числа, наблюдается явление теплового эха (см. главу 2). Хотя рассматриваемые явления не периодичны в строгом смысле этого слова, при некоторых условиях, о которых будет сказано ниже, их всё же можно рассматривать, как периодически.

Как видно из формулы (4.14), определяющих τ_0 , при $N \rightarrow \infty$ квазипериод τ_0 стремится к бесконечности. В этом случае для конечных t в формуле (4.13) остается только одно — первое слагаемое. Из формулы для дисперсии перемещений (4.6) получаем в пределе $N \rightarrow \infty$:

$$\langle \tilde{u}_k^2 \rangle = 2\sigma^2 \mathcal{I}^2 J_0(4\omega_e t). \quad (4.15)$$

Для интеграла, приведённого в формуле (4.15) можно найти представление в функциях Бесселя и Струве. Перепишем выражение (4.15):

$$\langle \tilde{u}_k^2 \rangle = \frac{\sigma^2}{8\omega_e^2} \Phi(4\omega_e t), \quad \Phi(z) \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{I}^2 J_0(z). \quad (4.16)$$

Ниже найдём точное выражение для функции Φ . Проинтегрируем функцию Бесселя и получим [1]:

$$\begin{aligned} \int J_0(z) dz &= zJ_0(z) - \int z dJ_0(z) = \\ &= zJ_0(z) + \int zJ_1(z) dz = zJ_0(z) + \frac{\pi z(H_0(z)J_1(z) - H_1(z)J_0(z))}{2}, \end{aligned} \quad (4.17)$$

где $H_n(z)$ — функция Струве, и использовано, что

$$\frac{d}{dz} J_0(z) = -J_1(z) \quad (4.18)$$

и

$$\int z J_1(z) dz = \frac{\pi z (H_0(z) J_1(z) - H_1(z) J_0(z))}{2}. \quad (4.19)$$

Проинтегрируем выражение (4.17) повторно. Первый интеграл вычисляется элементарно:

$$\int z J_0(z) dz = z J_1(z). \quad (4.20)$$

Интегрирование дроби в (4.17) произведём по частям:

$$\begin{aligned} & \int \frac{\pi z (H_0(z) J_1(z) - H_1(z) J_0(z))}{2} dz = \\ & = \frac{\pi z^2 (H_0(z) J_1(z) - H_1(z) J_0(z))}{2} - \int z d \left(\frac{\pi z (H_0(z) J_1(z) - H_1(z) J_0(z))}{2} \right) = \\ & = \frac{\pi z^2 (H_0(z) J_1(z) - H_1(z) J_0(z))}{2} - \int z^2 J_1(z) dz = \\ & = \frac{\pi z^2 (H_0(z) J_1(z) - H_1(z) J_0(z))}{2} - z^2 J_2(z), \end{aligned} \quad (4.21)$$

Объединяя формулы (4.20) и (4.21) для Φ получаем:

$$\Phi(z) = z J_1(z) - z^2 J_2(z) + \frac{\pi z^2 (H_0(z) J_1(z) - H_1(z) J_0(z))}{2}. \quad (4.22)$$

Воспользуемся рекуррентным соотношением для функций Бесселя[1]:

$$\frac{2n}{z} J_n(z) = J_{n-1}(z) + J_{n+1}(z), \quad (4.23)$$

для $n = 1$ и выразим $J_2(z)z^2$:

$$J_2(z) = \frac{2J_1(z) - zJ_0(z)}{z}. \quad (4.24)$$

Подстановка (4.24) в (4.22) даёт окончательную формулу для Φ :

$$\Phi(z) = z^2 J_0(z) - z J_1(z) + \frac{\pi z^2 (H_0(z) J_1(z) - H_1(z) J_0(z))}{2}. \quad (4.25)$$

Таким образом:

$$\langle \tilde{u}_k^2 \rangle = \frac{\sigma^2}{8\omega_e^2} \left(z^2 J_0(z) - z J_1(z) + \frac{\pi z^2 (H_0(z) J_1(z) - H_1(z) J_0(z))}{2} \right) \quad (4.26)$$

График функции $\Phi(z)$ представлен на рис. 4.1. Как видно из рисунка функция монотонно возрастающая. Найдём асимптотики функции Φ при больших и малых значениях аргумента z . Для малых z воспользуемся следующим разложением в ряд функций Бесселя и функций Струве [1]:

$$\begin{aligned} J_\alpha(z) &= \left(\frac{z}{2}\right)^\alpha \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k \left(\frac{z}{2}\right)^{2k}}{k! \Gamma(k + \alpha + 1)}, \\ H_\alpha(z) &= \left(\frac{z}{2}\right)^{\alpha+1} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k \left(\frac{z}{2}\right)^{2k}}{\Gamma(k + \frac{3}{2}) \Gamma(k + \alpha + \frac{3}{2})}. \end{aligned} \quad (4.27)$$

где Γ — гамма-функция. При $\alpha = 0, 1, 2$ для функции Бесселя в (4.27) имеем:

$$\begin{aligned} J_0(z) &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k \left(\frac{z}{2}\right)^{2k}}{(k!)^2} = 1 - \frac{z^2}{4} + \frac{z^4}{64} + O(z^6) \\ J_1(z) &= \frac{z}{2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k \left(\frac{z}{2}\right)^{2k}}{k!(k+1)!} = \frac{z}{2} - \frac{z^3}{16} + \frac{z^5}{384} + O(z^7) \end{aligned} \quad (4.28)$$

Для функции Струве с порядками 0 и 1 получаем следующие представления:

$$\begin{aligned} H_0(z) &= \frac{z}{2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k \left(\frac{z}{2}\right)^{2k}}{\Gamma(k + \frac{3}{2}) \Gamma(k + \frac{3}{2})} = \frac{2}{\pi} z - \frac{2}{9\pi} z^3 + \frac{2}{225\pi} z^5 + O(z^6), \\ H_1(z) &= \left(\frac{z}{2}\right)^2 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k \left(\frac{z}{2}\right)^{2k}}{\Gamma(k + \frac{3}{2}) \Gamma(k + \frac{5}{2})} = \frac{2}{3\pi} z^2 - \frac{2}{45\pi} z^4 + O(z^6). \end{aligned} \quad (4.29)$$

Подстановкой первых членов разложений (4.28)-(4.29) в (4.25) находим, что при малых z , функция Φ имеет квадратичную форму:

$$z \ll 1 \quad \Rightarrow \quad \Phi(z) \simeq \frac{z^2}{2}. \quad (4.30)$$

Найдём асимптотику Φ при больших z . Воспользуемся приближением:

$$z \rightarrow \infty, \quad J_0(z) = \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \cos\left(z - \frac{\pi}{4}\right). \quad (4.31)$$

Тогда справедливо:

$$z \rightarrow \infty, \quad \int J_0(z) dz \simeq \int \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \cos(z) = 2C(z), \quad (4.32)$$

где $C(z)$ — интеграл Френеля. Повторное интегрирование приводит к следующей формуле:

$$z \rightarrow \infty, \quad C(z) \rightarrow \frac{1}{2} \quad \Rightarrow \quad \Phi(z) = \int 2C(z) dz \simeq z. \quad (4.33)$$

Таким образом, в случае кристалла, состоящего из бесконечного числа частиц, дисперсия перемещений представляет собой монотонно возрастающую функция от времени. Вблизи асимптоты дисперсия перемещений совершает затухающие колебания. На больших временах рост дисперсии перемещений можно считать практически линейной, совпадающей с асимптотой:

$$t \gg t_e \stackrel{\text{def}}{=} \frac{2\pi}{\omega_e} : \quad \langle \tilde{u}_k^2 \rangle \simeq \frac{\sigma^2}{2\omega_e} t. \quad (4.34)$$

В следующей части проводится анализ дисперсии перемещений на временах порядка одного квазипериода для случая конечного кристалла.

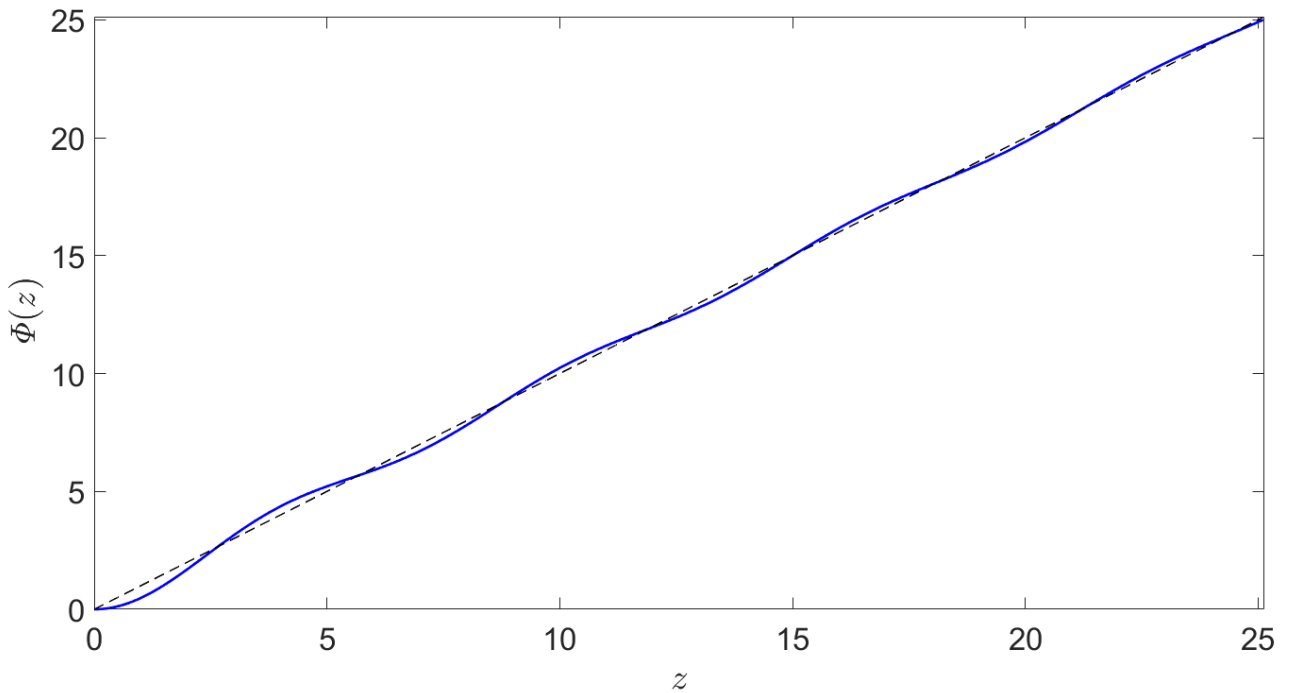


Рис. 4.1: График функции дисперсии перемещений в бесконечном кристалле $\Phi(z)$. Пунктиром показана асимптота $\Phi(z) \simeq z$.

4.3 Случай малых времён

В настоящей главе рассматривается первый квазипериод дисперсии перемещений — временной отрезок от нуля, вплоть до τ_0 в конечном кристалле. В этом случае необходимо учитывать только первое слагаемое в представлении (4.35) для лагранжиана системы

$$\mathbb{L} = \frac{m}{2} \tilde{\lambda}(t) = \frac{m\sigma^2}{2} J_0(4\omega_e t) - \frac{\sigma^2 m}{2N}, \quad (4.35)$$

что позволяет выразить дисперсию перемещений в следующем виде:

$$\langle \tilde{u}_k^2 \rangle = 2\sigma^2 \mathcal{I}^2 J_0(4\omega_e t) - \frac{\sigma^2 t^2}{N}. \quad (4.36)$$

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

Для оценки дисперсии перемещений при $t \rightarrow \infty$, $N \rightarrow \infty$ необходимо заменить повторный интеграл от $J_0(4\omega_e t)$ зависимостью вида (4.34):

$$\langle \tilde{u}_k^2 \rangle \simeq \frac{\sigma^2}{N} t (\tau_0 - t) \quad (4.37)$$

Отсюда видно, что дисперсия перемещений имеет квадратичную форму от времени (представляет собой перевернутой параболу). Следует отметить, что самые максимальные отклонения от квадратичной зависимости обнаруживаются ближе к границам рассматриваемого интервала. Однако, эти отклонения с ростом числа частиц в кристалле уменьшаются. Чем больше число частиц, тем лучше аппроксимация (4.34). На рис. 4.2 приводится сравнение дисперсии перемещений для нескольких квазипериодов, описываемых точной и асимптотической формулами.

Из формулы (4.37) следует, что в момент времени $t = \tau_0$ дисперсия перемещений обращается в ноль. Это означает, что в этот момент времени перемещения всех частиц в цепочке в термодинамическом пределе обращаются в ноль. Цепочка практически возвращается в исходное состояние. Отметим, что возвращение не полное, кинетическая температура кристалла в момент времени τ_0 не равна начальной температуре, как было показано в главе 2. Время τ_0 много больше времени составляющей период колебаний частиц, но это время достаточно мало на макроскопических масштабах. Квазипериод τ_0 пропорционален времени, которое необходимо звуку, чтобы пройти половину длины кристалла. Так как моменты времени кратные квазипериоду, тоже являются квазипериодами, то дисперсия перемещений обращается в ноль в моменты времени кратные τ_0 — бесконечное число раз. Формула (4.37) приближенная, и чем больше N , тем более точное приближение она даёт. Это значит, что для достаточно больших

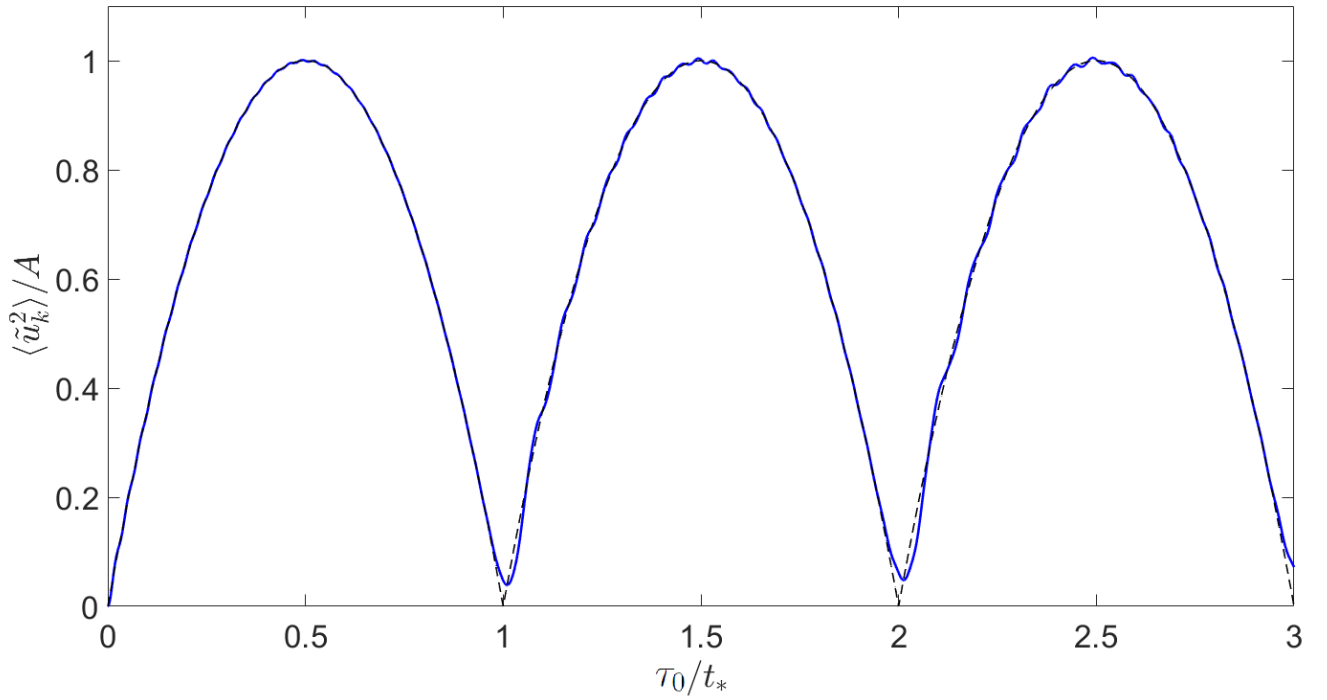


Рис. 4.2: Зависимость дисперсии центрированных перемещений от времени для $N = 100$ (сплошная линия); предельная зависимость при $N \rightarrow \infty$ (пунктир); обозначено: $A \stackrel{\text{def}}{=} \sigma^2 \tau_0^2 / (4N)$ — максимальное значение дисперсии при $N \rightarrow \infty$.

кристаллов, содержащих огромное число частиц, возвращение кристалла в исходное состояние должно выполняться с высокой точностью.

На языке описания колебаний кристалла собственными формами явлению возвращения перемещений кристалла в исходное состояние можно дать следующее объяснение. В длинноволновом приближении все собственные частоты кратны самой низкой частоте, которая соответствует квазипериоду τ_0 . Из этого следует, в квазипериоде τ_0 содержится целое число любого из собственных периодов. Квазипериод, тем самым, становится, в некотором смысле, периодом колебаний кристалла. Это верно только приближенно. Для точных уравнений, оказывается, что высшие частоты уже не кратны низшей. Это отклонение тем меньше, чем больше частиц содержит кристалл. Таким образом, можем прийти к выводу, что чем больше частиц в рассматриваемом кристалле, тем точнее оказываются приближённые формулы. В этом случае более ярко проявляется эффект возвращения.

4.4 Асимптотика для больших N

В настоящем разделе приводятся формулы для асимптотики дисперсии перемещений при большом числе частиц и больших временах.

Для больших z может быть использовано асимптотическое представление

$$J_{2pN}(z) \simeq \delta(z - 2pN), \quad (4.38)$$

где δ — дельта-функция Дирака, p целое неотрицательное число. Согласно формуле (4.38) существует такое изменение масштабов осей, что функция Бесселя стремится к дельта функции. Формально это можно выразить соотношением [82]

$$A \rightarrow \infty, \quad AJ_A(A(z - n) + A) \rightarrow \delta(z - n), \quad (4.39)$$

где предел понимается в слабом (обобщённом) смысле. Для интегралов от функции Бесселя, которые потребуются для определения дисперсии перемещений, этот предел и соответствующая асимптотика могут уже рассматриваться в классическом смысле. Подстановка выражения (4.38) в формулу для приведённого лагранжиана (4.12) даёт

$$\lambda(t) \simeq \frac{\sigma^2}{4\omega_e} \left(\delta(t) + 2 \sum_{p=1}^{\infty} \delta(t - p\tau_0) \right), \quad (4.40)$$

где использовано, что для положительных a выполняется $\delta(ax) = \delta(x)/a$. Представление (4.40) является периодическим, причём величина τ_0 , имеющая смысл квазипериода (4.14) играет уже роль периода для функции (4.40). Значение квазипериода τ_0 пропорционально количеству частиц N (4.14), поэтому большие N в формуле (4.40) соответствуют большим временам. В этом случае наибольшие значения функции Бесселя реализуются в окрестности моментов времени $p\tau_0$, где $p = 0, 1, 2, 3, \dots$. Из этого следует, что из формулы (4.40) можно получить аппроксимацию выражения (4.35) для небольших p .

Асимптотически точное представление для дисперсий (4.37) можно получить применяя формулу (4.40) на открытом интервале $(0, \tau_0)$. На последующих

временных интервалах продолжительностью τ_0 функции периодически повторяются. Результат можно представить в виде

$$\langle \tilde{u}_k^2 \rangle \simeq \sum_{p=0}^{\infty} f(t - p\tau_0), \quad (4.41)$$

где функция $f(t)$ на замкнутом интервале $[0, \tau_0]$ определяются формулами

$$f(t) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\sigma^2}{N} t (\tau_0 - t) \quad (4.42)$$

и равны нулю вне указанного интервала.

Согласно (4.41)–(4.42) после первоначального теплового удара дисперсия перемещений растёт сперва линейно, потом рост ее замедляется, и при $t = \tau_0/2$ достигается максимум (см. рис. 4.2)

$$\langle \tilde{u}_k^2 \rangle_{\text{max}} \simeq \frac{\sigma^2 \tau_0^2}{4N} = \frac{\sigma^2 N}{16\omega_e^2}. \quad (4.43)$$

Согласно уравнению (4.43) максимальная величина дисперсии оказывается пропорциональной числу частиц N . Это означает, что максимальные перемещения частиц относительно центра масс кристалла пропорциональны \sqrt{N} . После того, как было достигнуто максимальное значение дисперсии перемещений наблюдается симметричный спад, который в конечном итоге приводит к тому, что дисперсия перемещений при $t = \tau_0$ обращению в ноль. После этого, процесс повторяется. Дисперсия перемещений растёт, достигает максимума и спадает до нуля и так далее. Описываемое поведение система демонстрирует на макроскопических временах. На микроскопических временах в системе наблюдаются переходные процессы. Вблизи моментов времени $t = p\tau_0$ согласно формулам (4.41)–(4.42) эти переходные процессы представляют собой излом зависимости дисперсии во времени. Более точное представление о них можно получить из формулы (4.35), согласно которой, переходные процессы представляют собой высокочастотные колебания, наложенные на кривую (4.41)–(4.42). Отметим что в формулах (4.41)–(4.42) для достижения одинаковой точности для перемещений и скоростей требуются значения N , различающиеся на порядки. Так, согласно рис. 4.2, уже при $N = 100$ наблюдается хорошее согласие точной и

асимптотической формул для дисперсии перемещений. Заметим, что согласно формуле (4.6), дисперсия скоростей связана линейно с приведённым лагранжианом (4.12), поэтому график на рис. 2.2 характеризует временную зависимость дисперсии скоростей. Таким образом, соответствующие графики дисперсии скоростей при $N = 10^6$ все ещё достаточно далеки от соответствующего асимптотического представления— см. рис. 2.2. Это различие связано с тем, что переход от дисперсии скоростей к дисперсии перемещений осуществляется посредством двукратного интегрирования, а интегрирование сильно сглаживает зависимости. Обратный переход, напротив, требует двукратного дифференцирования, что приводит к сильному росту высокочастотной составляющей.

4.5 Сравнение средних по ансамблю и пространству

Описанные в предыдущих разделах настоящей главы результаты относятся к математическому ожиданию квадрата перемещения, величины, которая получается осреднением по статистическому ансамблю. Для реальных систем описанные результаты могут быть получены, в результате осреднения по большому числу экспериментов с начальными условиями, характеризующимся одинаковыми статистическими характеристиками. Заметим, что, вообще говоря, результат каждого конкретного эксперимента может существенно отличаться от приведённых выше. Анализ результатов численных расчётов позволяет заключить, что временные зависимости дисперсии перемещений усреднённые по пространству очень сильно отличаются в каждом из численных экспериментов от картины, даваемой формулами (4.41)–(4.42). Сравнение средних по пространству квадратов перемещений и дисперсии перемещений приведено на рис. 4.3.

Определим величину

$$\{\tilde{u}_k^2\} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \tilde{u}_k^2 = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N (u_k - \bar{u})^2. \quad (4.44)$$

где фигурные скобки означают осреднение по пространству (или, что в данном случае то же самое, по частицам). Далее, для краткости, будем называть

величину $\{\tilde{u}_k^2\}$ средним квадратом перемещений. Некоторые из зависимостей среднего квадрата перемещений от времени, полученные в результате численного решения начальной задачи (1.6)–(1.7) для различных вариантов статистически одинаковых случайных начальных условий изображены на рис. 4.3. Как видно, из анализа графиков на рис. 4.3, средний квадрат перемещений $\{\tilde{u}_k^2\}$ случайная величина, и для разных начальных условий получают разные кривые. Такое поведение отличается от временной зависимости $\langle \tilde{u}_k^2 \rangle$, которая является детерминированной величиной. Можно видеть, что зависимость $\{\tilde{u}_k^2\}(t)$ приближается к нулю, а зависимость $\langle \tilde{u}_k^2 \rangle(t)$ обращается в ноль периодически при $t = p\tau_0$. Также, $\{\tilde{u}_k^2\}(t)$ практически повторяются на каждом из квазипериодов, тогда как $\langle \tilde{u}_k^2 \rangle(t)$ идентичны на интервале $t \in (p\tau_0, (p+1)\tau)$. Но если, дисперсия перемещений на каждом из квазипериодов имеет параболическую форму, то временная зависимость $\{\tilde{u}_k^2\}(t)$ в разных численных экспериментах принимает различную форму. В рамках одного квазипериода $\{\tilde{u}_k^2\}(t)$ может демонстрировать несколько максимумов, а максимумы различных реализаций могут отличаться во много раз друг от друга.

Зависимость $\langle \tilde{u}_k^2 \rangle(t)$ является математическим ожиданием зависимостей $\{\tilde{u}_k^2\}(t)$. То есть может быть получена, как предел среднего значения зависимостей $\{\tilde{u}_k^2\}(t)$ по случайным реализациям начальных условий при числе этих реализаций, стремящихся к бесконечности. Однако, зависимости $\langle \tilde{u}_k^2 \rangle(t)$ не стремятся к $\{\tilde{u}_k^2\}(t)$ при увеличении числа частиц. Даже для очень больших N средний квадрат перемещений $\{\tilde{u}_k^2\}$ остаётся случайной величиной. Таким образом, для квадрата перемещений среднее по пространству и среднее по ансамблю существенно различаются. Стоит отметить, что обратная ситуация наблюдается для дисперсии скоростей: величина $\{\tilde{v}_k^2\}$ при увеличении N стремится к $\langle \tilde{v}_k^2 \rangle$ — дисперсии скоростей, пропорциональной кинетической температуре кристалла.

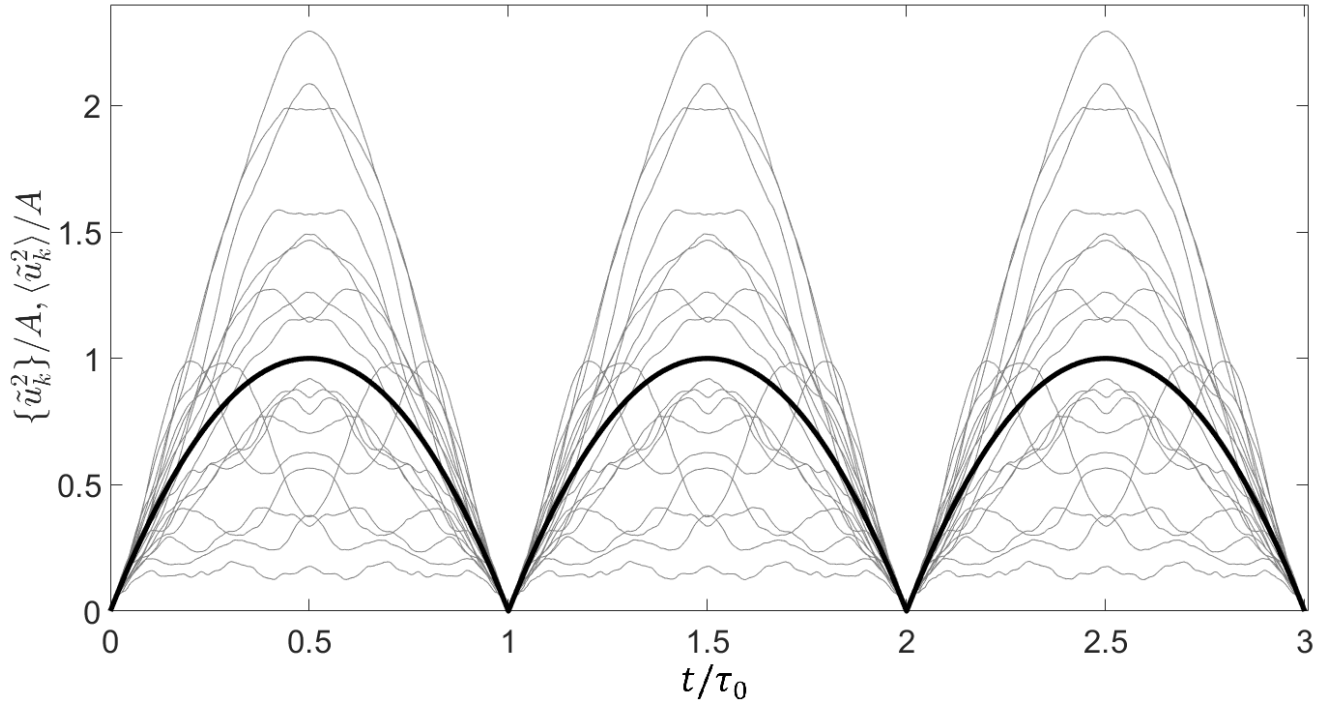


Рис. 4.3: Средний по пространству квадрат перемещений $\{\tilde{u}_k^2\}$ для различных реализаций при $N = 1000$ (тонкие линии); дисперсия перемещений $\langle \tilde{u}_k^2 \rangle$ (жирная линия); обезразмеривающий множитель: $A \stackrel{\text{def}}{=} \sigma^2 t_*^2 / (4N)$.

4.6 Заключение к главе 4

В настоящей главе проанализирован особый тип переходных процессов, связанный с перемещениями частиц, которые мы называем диффузионными процессами. Эти переходные процессы реализуются в кольцевом одномерном кристалле в том случае, если в начальный момент времени он подвергся однородному тепловому воздействию. В главе представлены точные зависимости, описывающие эволюцию во времени дисперсии перемещений частиц.

Основной результат состоит в следующем: В пределе бесконечного кристалла дисперсия перемещений неограниченно растёт по линейному закону (рис. 4.1). С другой стороны в случае конечного кристалла рост дисперсии перемещений ограничен величиной, пропорциональной числу частиц. В моменты времени, когда в системе наблюдается тепловая дисперсия перемещений обращается в нуль. Причём на это зависимость наложены высокочастотные колебания (рис. 4.2). Таким образом, кристалл возвращается в состояние, близкое к исходному, за половину времени пробега звуковой волны через кристалл — период незначи-

тельный по макроскопическим масштабам. Чем больше частиц в кристалле, тем ярче выражен эффект возвращения и тем ближе закон изменения дисперсии к параболическому.

Ещё одним важным результатом является сравнение среднего значения квадрата перемещений по пространству и статистического среднего по реализациям. Эти величины оказываются различными. Первая — случайна (для любого числа частиц), а вторая — детерминированна (см. рис. 4.3).

Таким образом, как тепловые (см. главы 2-3), так и диффузионные процессы в конечном кристалле значительно сложнее, чем в бесконечном. Диффузионные процессы в конечном кристалле, в свою очередь, сложнее, чем тепловые — они включают быстрые и медленные движения, средние по кристаллу сохраняют стохастическую природу даже при очень большом числе частиц.

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

Литература

- [1] Handbook of Mathematical Functions With Formulas, Graphs, and Mathematical Tables/ Abramowitz, M., Stegun. I.A. // New York: Dover. 1964. 1046 p.
- [2] Computer Simulation of Liquids/ Allen M., Tildesley A.// Clarendon Press, Oxford. 1987. 390 p.
- [3] Use of the Stress Function in Thermoelasticity/ Almansi E. // Mem. RealeAccad. Sci. Torino. 1897. S. 2, Vol. 47.
- [4] Achievement of ultimate values of the bulk and shear strengths of iron irradiated by femtosecond laser pulses/Ashitkov S.I. et al.// JETP Letters. 2013. Vol. 98, №7.
- [5] Energy oscillations in a one-dimensional harmonic crystal on an elastic substrate/Babnikov M.B., Krivtsov A.M., Tsvetkov D.V.//Physical Mesomechanics. 2016. Vol.19. №3.
- [6] Document Mechanical properties of bulk carbon nanomaterials/ Baimova Y.A., Murzaev R.T., Dmitriev S.V. // Physics of the Solid State. 2014. Vol. 56, №10.
- [7] Bass R. Kinetic energy of an electron gas. // Phys. Rev. B, Vol.32, №4.
- [8] Berinskii I.E., Kuzkin V.A. Equilibration of energies in a two-dimensional harmonic graphene lattice // Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences. 2019. Vol. 378, № 2162.

- [9] Berinskii I.E., Krivtsov A.M. A hyperboloid structure as a mechanical model of the carbon bond // International Journal of Solids and Structures. 2016. Vol. 96, № 152.
- [10] Berman G. P., Izrailev F.M. The Fermi–Pasta–Ulam problem: Fifty years of progress. // Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science, 2005. Vol. 15. №1, P. 015104.
- [11] Fourier’s law: a challenge to theorists/Bonetto, F., Lebowitz, J.L., Rey-Bellet, L. //Mathematical Physics. 2000. pp. 128-150.
- [12] Dynamical Theory of Crystal Lattices /Born M., Huang K. // London and New York: Oxford University Press. 1954.
- [13] Chemical Bonding in Solids /Burdett J. K.// Oxford: Oxford University Press. 1995.
- [14] Nanoscale thermal transport / Cahill D.G. et al. // Journal of Applied Physics. 2003. Vol. 93, №2, P. 793–818.
- [15] Breakdown of Fourier’s Law in Nanotube Thermal Conductors /Chang C.W. et al. // Phys. Rev. Lett. 2008. Vol.101, P. 075903.
- [16] Chang C.W. In: Thermal transport in low dimensions. Lecture Notes in Physics. 2016. Vol. 921, pp. 305-338.
- [17] Heat Transport in low-dimensional systems /Dhar A. // Advanced in Physics. 2008. Vol. 57. №5.
- [18] Heat transport and current fluctuations in harmonic crystals / Dhar A., Dandekar R. // Physica A: Statistical Mechanics and Its Applications. 2015. Vol. 418.
- [19] Equilibration of sinusoidal modulation of temperature in linear and nonlinear chains / Korznikova E. A. et al. // Physical Review E. 2020. Vol. 102. №6.

- [20] Longitudinal stiffness and thermal conductivity of twisted carbon nanoribbons/
Savin A. V. et al. // European Journal of Mechanics. A/Solids. 2019. Vol. 80. P.
103920.
- [21] On the convergence to statistical equilibrium for harmonic crystals / Dudnikova
T. V., Komech A. I., Spohn H. // Journal of Mathematical Physics. 2003. Vol.
44. №6. P. 2596.
- [22] On the convergence to a statistical equilibrium in the crystal coupled to a scalar
field. / Dudnikova, T.V., Komech, A.I. Russ. J. Math. Phys. 2005. Vol. 12, №3.
- [23] Second mémoire sur les phénomènes thermomécaniques. / Duhamel J.-M.-C.
// J. de l'École Polytechnique. 1837. T. 15. C. 25.
- [24] On the reversion of an asymptotic expansion and the zeros of the Airy functions.
/ Fabijonas B.R., Olver F.W.J. // SIAM Rev. Vol. 1999. 41. № 762.
- [25] High-intensity isolated attosecond X-ray pulse generation by using low-intensity
ultraviolet–mid-infrared laser beam / Feng L., Li Y. // The European Physical
Journal D. Vol. 2018. 72. № 9.
- [26] Studies of nonlinear problems. I./ Fermi E., Pasta J. and Ulam S. // Los Alamos
report LA-1940. 1955. Published later in Collected Papers of Enrico Fermi. E.
Segre (Ed). 1965. Chicago: University of Chicago Press.
- [27] Théorie analytique de la chaleur / Fourier J.B.J. // Firmin Didot. Paris. 1822.
- [28] The Fermi-Pasta-Ulam Problem: A Status Report. /Edited by G. Gallavotti //
Lecture Notes in Physics. 2008. Springer. Berlin: Heidelberg. 728 P.
- [29] Heat transfer in a one-dimensional harmonic crystal in a viscous environment
subjected to an external heat supply. /Gavrilov S. N., Krivtsov A. M., Tsvetkov
D. V. // Continuum Mechanics Thermodynamics. 2019. Vol. 31 №1.
- [30] Steady-state kinetic temperature distribution in a two-dimensional square
harmonic scalar lattice lying in a viscous environment and subjected to a

- point heat source/ Gavrilov S.N., Krivtsov A.M. // Continuum Mechanics Thermodynamics. 2020. Vol.32. №1.
- [31] Normal heat conductivity of the one-dimensional lattice with periodic potential of nearest-neighbor interaction / Gendelman O.V., Savin A.V. // Phys. Rev. Lett. Vol. 2000. 84. № 11.
- [32] Non-stationary heat conduction in one-dimensional chains with conserved momentum /Gendelman O.V., Savin A.V. //Physical Review E. 2010. Vol. 81. P. 020103(R).
- [33] Nonstationary heat conduction in one-dimensional models with substrate potential /Gendelman O. V. et al. // Physical Review E. 2012. Vol. 85. №1.
- [34] Quench echoes in molecular dynamics—A new phonon spectroscopy / Grest G. S., Nagel S. R., Rahman A. // Solid State Communications. 1980. Vol 36. №10.
- [35] Ergodic Properties of Microcanonical Observables / Giardinà C., Livi R. // Journal of Statistical Physics. 1998. Vol. 91 №5/6.
- [36] Mechanics of deformation and fracture of nanomaterials and nanotechnology. / Goldstein R. V., Morozov N. F. // Physical Mesomechanics.2007. Vol. 10 №5-6.
- [37] The influence of a nanocrystal size on the results of molecular-dynamics modeling. / Golovnev I. F., Golovneva E. I., Fomin V.M. // Comp. Mat. Sci. 2006. Vol. 36. №. 176.
- [38] Oscillatory-damping temperature behavior in one-dimensional harmonic model of a perfect crystal. /Guzev M. A., Dmitriev A. A. //Dal'nevost. Mat. Zh. 2017. Vol. 17. № 2.
- [39] Different representations for solving one-dimensional harmonic model of a crystal. /Guzev M.A., Dmitriev A.A. // Dal'nevost. Mat. Zh. 2017. Vol. 17 № 1.

- [40] Wave-relaxation duality of heat propagation in fermi–pasta–ulam chains /Gusev A. A., lurie S. A. // Modern physics letters b.2012. Vol. 26 №22.
- [41] Neutron investigation of the dynamical properties of the mercury-chain compound $Hg_{3-\delta}AsF_6$ /Heilmann I. U. et al. // Physical Review B. 1979. Vol. 20. №2.
- [42] Dynamic and stochastic types of motion in the linear chain. /Hemmer, P.C. // Doktorsavhandlingar / Norges Tekniske Høgskole. 1959. No. 58 Trondheim : Tapir Forlag.
- [43] Shock-wave structure via nonequilibrium molecular dynamics and Navier-Stokes continuum mechanics. / Holian B. L. // Physical Review A. 1980. Vol. 22 №6.
- [44] One-Dimensional Phonons and «Phase-Ordering» Phase Transition in $Hg_{3-\delta}AsF_6$. / Hastings J. M. et al.// Physical Review Letters. 1977. Vol. 39, № 23.
- [45] Heat-flow equation motivated by the ideal-gas shock wave. / Holian B.L., Mareschal M. // Physical Review E. 2010. Vol. 82, P. 026707.
- [46] Shock-wave compression and Joule-Thomson expansion. / Hoover W. G., Hoover C. G., Travis K. P. // Physical Review Letters. 2014. Vol. 112. №144504.
- [47] Simulation and Control of Chaotic Nonequilibrium Systems: Advanced Series / Hoover W.G., Hoover C.G. // In Nonlinear Dynamics. 2015. Vol. 27. World Scientific. Singapore. 324 p.
- [48] Nonequilibrium temperature and thermometry in heat-conducting ϕ^4 models. /Hoover W. G., Hoover C. G. // Physical Review E.2008. Vol. 77, № 4.
- [49] Micron-scale ballistic thermal conduction and suppressed thermal conductivity in heterogeneously interfaced nanowires. /Hsiao, T.,K. et al. //Phys. Rev. B. 2015. Vol91, №3.

- [50] Self-oscillating mode of a nanoresonator. /Indeitsev D.A. // Physical Mesomechanics. 2016. Vol.19, №5.
- [51] Thermoelastic waves in a continuum with complex structure. /Indeitsev D.A. // ZAMM-Z. Angew. Math. Mech. 2009. Vol. 89, №4.
- [52] A two-temperature model of optical excitation of acoustic waves in conductors. /Indeitsev D. A., Osipova E. V. // Doklady Physics. 2017. Vol.62, №3.
- [53] First-principles simulations of the stretching and final breaking of Al nanowires: Mechanical properties and electrical conductance /Jelínek P. // Physical Review B. 2003. Vol.68, №8.
- [54] Microscopic expressions for the thermodynamic temperature. / Jepps O. G., Ayton G., Evans, D. J. // Physical Review E. 2000. Vol. 62, №4.
- [55] Molecular dynamics simulation of the crystal structure evolution of titanium under different Tdamp values and heating/cooling rates /Jiang J. et al. // Chemical Physics Letters. 2020. P. 138187.
- [56] History and philosophy of science through models: some challenges in the case of «the atom» /Justi R., Gilbert J. // International Journal of Science Education. 2000. Vol 22, №9.
- [57] Ударно-волновые явления в конденсированных средах /Канель Г. И. // Янус-К. Москва. 1996. 407 С.
- [58] Nonequilibrium stationary state of a harmonic crystal with alternating masses /Kannan V., Dhar A., Lebowitz J. L. // Phys. Rev. E. 2012. Vol. 85, №4.
- [59] Using Stability Analysis of Discrete Elastic Systems to Study the Buckling of Nanostructures. / Korobeynikov S. N.// Archives of Mechanics. 2012. Vol64, №4.
- [60] The crystal lattice: phonons, solitons, dislocations, superlattices. // Kosevich A.M. / John Wiley & Sons, 2006.

- [61] Discrete and continuum thermomechanics./ Krivtsov, A.M., Kuzkin, V.A.// In: Altenbach H., Ochsner A. (eds) Encyclopedia of Continuum Mechanics. 2018. Springer, Berlin, Heidelberg.
- [62] Energy oscillations in a one-dimensional crystal. / //Krivtsov A.M. Doklady Physics.2014. Vol.59, №9.
- [63] On unsteady heat conduction in a harmonic crystal. / Krivtsov A. M. // ArXiv Preprint. 2015. URL:<https://arxiv.org/abs/1509.02506>
- [64] Heat transfer in infinite harmonic one dimensional crystals. / Krivtsov A. M. // Doklady Physics. 2015.Vol. 60, №9.
- [65] From nonlinear oscillations to equation of state in simple discrete systems. / //Krivtsov A. M. Chaos, Solitons & Fractals. 2003. Vol. 17, №1.
- [66] On mechanical characteristics of nanocrystals. / Krivtsov A. M., Morozov N. F. // Physics of the Solid State. 2002. Vol. 44. №12.
- [67] The ballistic heat equation for a one-dimensional harmonic crystal. / Krivtsov A.M. // In: Altenbach, H., Belyaev, A., Eremeyev, V.A.,Krivtsov, A., Porubov, A.V. (eds.) Dynamical Processes in Generalized Continua and Structures. 2019. Springer, Berlin.
- [68] On Mechanical Characteristics of Nanocrystals/ Krivtsov A. M., Morozov N. F. // Physics of the Solid State. 2002. Vol. 44, № 12.
- [69] Generation of femtosecond current pulses using the inverse magneto-optical Faraday effect. / Kruglyak V. V., Portnoi M. E. // Technical Physics Letters. 2005. Vol. 31, №12.
- [70] Temperature dependence of the structure and dynamics of myoglobin. /Kuczera K., Kuriyan J., Karplus M. // Journal of Molecular Biology. 1990. Vol. 213, №2.

- [71] Ballistic resonance and thermalization in Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou chain at finite temperature. /Kuzkin V.A., Krivtsov A.M. // Physical Review E. 2020. Vol. 101, №4
- [72] Thermal equilibration in infinite harmonic crystals / Kuzkin V.A. // Continuum Mechanics and Thermodynamics. 2019. Vol. 31, P. 1401–1423
- [73] Transition to thermal equilibrium in a crystal subjected to instantaneous deformation. / Krivtsov A.M., Murachev A.S. // Journal Physics Condensed Matter. 2021. Vol. 33. P. 215403
- [74] Attosecond pulse metrology. / Orfanos I. et al. // APL Photonics. 2019. Vol.4, №8.
- [75] Sur la mecanique statistique des phenomenes irreversibles /Klein G., Prigogine I. // Physica. 1953. Vol. 19, P. 1053.
- [76] Equilibration of sinusoidal modulation of temperature in linear and nonlinear chains. / Korznikova E.A. et al. // Phys. Rev. E. 2020. Vol.102, №6.
- [77] Fast and slow thermal processes in harmonic scalar lattices. / Kuzkin, V. A., Krivtsov, A. M. // Journal of Physics: Condensed Matter. 2017. Vol. 29, №50.
- [78] Unsteady heat transfer in harmonic scalar lattices / Kuzkin V. A., Krivtsov, A. M. // ArXiv Preprint. 2017. URL:<https://arxiv.org/abs/1702.08686v3>
- [79] Nonlinear positive/negative thermal expansion and equations of state of a chain with longitudinal and transverse vibrations. / Kuzkin V.A., Krivtsov, A.M. // Physica Status Solidi B. 2015. Vol. 252, №7.
- [80] An analytical description of transient thermal processes in harmonic crystals. / Kuzkin V. A., Krivtsov A. M. // Physics of the Solid State. 2017. Vol. 59, №5.
- [81] Equilibration of kinetic temperatures in face-centered cubic lattices. / Kuzkin V.A., Liazhkov S.D. // Physical Review E. 2020. Vol. 102, №4.

- [82] Short Notes: An Expression for the Dirac Delta Function. II An Expression for the Dirac Delta Function. I. / Lamborn, B. N. A. // SIAM Review. 1969. Vol. 11. №4.
- [83] Ultrashort Laser Pulse Heating of Nanoparticles: Comparison of Theoretical Approaches / Letfullin R. R. // Advances in Optical Technologies. 2008. Vol.1–8.
- [84] Thermal conduction in classical low-dimensional lattices. / Lepri S., Livi R., Politi A. // Physics Reports. Vol. 2003. Vol. 377, №1.
- [85] Solid-state stress-induced phase transitions in a material with nanodimensional inhomogeneities: Model and computational experiment. / Levin V.A. // Doklady Physics. 2010. Vol.55, №10.
- [86] Measurement and calculation of the thermal expansion coefficient of diamond. / Moelle C. et al. Diamond and Related Materials. 1997. Vol.6, №5-7.
- [87] Experimental Evaluation of Structural and Temporal Characteristics of Material Fracture Based on Magnetic Pulse Loading of Ring Samples. /Morozov V. A., Petrov Y. V., Sukhov V. D. // Technical Physics.2019. Vol. 64. №5.
- [88] Thermal echo in a finite one-dimensional harmonic crystal. / Murachev A. S., A.M. Krivtsov A. M., Tsvetkov D.V. // Journal of Physics: Condensed Matter. 2019. Vol.31, №9.
- [89] Navier, C.L.M.H., Mémoire sur les lois de l'équilibre et du mouvement des corps solides élastiques, Mém. // Acad. Sci. Paris. 1827. T. VII.
- [90] Theorie des Elasticit ät der festen Körper und des Licht äthers. / Neumann, F. Vorlesung // Teubner. Leipzig. 1885.
- [91] Temperature echoes revisited to probe the vibrational behavior of dendrimers. / Paulo P. M. R. // The Journal of Chemical Physics. 2010. Vol. 132, №11.
- [92] Ultrafast heat transfer on nanoscale in thin gold films. / Poletkin K. V. et al // Applied Physics B. 2012. Vol. 107, №1.

- [93] Direct Nanoscale Imaging of Ballistic and Diffusive Thermal Transport in Graphene / Pumarol, M. E. et al. // Nanostructures. Nano Letters. 2012. Vol.12, №6.
- [94] Temperature determination for nanosecond pulsed laser heating. / Rekhi S., Tempere J., Silvera I. F. // Review of Scientific Instruments. 2003. Vol.74, №8.
- [95] Statistical mechanics. / Ruelle D. // Rigorous. Benjamin. 1974. 233 p.
- [96] Properties of a Harmonic Crystal in a Stationary Nonequilibrium State. / Rieder Z., Lebowitz J. L., Lieb E. // Journal of Mathematical Physics. 1967. Vol. 8, №5.
- [97] Dynamical Approach to Temperature. / Rugh H. H. // Physical Review Letters. 1997. Vol.78, №5.
- [98] Saadatmand D. et al. Discrete breathers assist energy transfer to ac-driven nonlinear chains. // 2018. Phys. Rev. E. Vol.97, №2, P. 022217.
- [99] Tesla-Scale Terahertz Magnetic Impulses. / Sederberg S., Kong F., Corkum P. B. // Physical Review X. 2020. Vol.10, №1.
- [100] Atomic structure and dynamic behaviour of truly one-dimensional ionic chains inside carbon nanotubes. / Senga R. et al. // Nature Materials.2014. Vol.13, №11.
- [101] A strain-softening bar with rehardening revisited. / Shishkina E. V., Gavrilov S. N. // Mathematics and Mechanics of Solids. 2016. Vol.21, №2.
- [102] Confined linear carbon chains as a route to bulk carbyne. / Shi L. et al. // Nature Materials. 2016. Vol.15. №6.
- [103] Zur Dynamik elastisch gekoppelter Punktsysteme. / Schrödinger E. // Annalen Der Physik. 1914. Vol. 349, №14.
- [104] Spatiotemporal isolation of attosecond soft X-ray pulses in the water window. / Silva F. et al. // Nature Communications. 2015. Vol.6, P.6611.

- [105] Change of entropy for the one-dimensional ballistic heat equation: Sinusoidal initial perturbation. / Sokolov A. A. et al. // Phys. Rev. E. 2019. Vol. 99, №4.
- [106] Experimental evidence for short-pulse laser heating of solid-density target to high bulk temperatures. / Soloviev A. et al. // Scientific Reports. 2017. Vol. 7, №1.
- [107] X-ray scattering study of one-dimensional lattice dynamics in $Hg_3 - \delta AsF_6$. / Spal R. // Physical Review B. 1980. Vol. 21, №8.
- [108] Stationary non-equilibrium states of infinite harmonic systems. / Spohn H., Lebowitz J.L. // Communications in Mathematical Physics. 1977. Vol. 54, №2.
- [109] Temperature dependence of TiN elastic constants from ab initio molecular dynamics simulations. / Steneteg, P. // Physical Review B. 2013. Vol. 87, №9.
- [110] Allgemeine Theoreme der mathematischen Elastizitätslehre (Integrationstheorie). / Tedone O. // Encyclopädie der mathematischen Wissenschaften. 1906. Vol. 4, Part D, pp. 55–124 and pp. 125–214 (second article written with A. Timpe).
- [111] Elongation and breaking mechanisms of gold nanowires under a wide range of tensile conditions / Tavazza F., Levine L. E., Chaka A. M. // Journal of Applied Physics. 2009. Vol. 106, № 4.
- [112] Ergodic features of harmonic-oscillator systems. II. Asymptotic ergodicity. / Titulaer, U. M. // Physica. 1973. Vol. 70, №2.
- [113] Ultrashort pulsed laser surface texturing. / Toyserkani E., Rasti N. // In Laser Surface Engineering. Edited by: J. Lawrence and D.G. Waugh. 2015. Woodhead Publishing. 718 p.
- [114] Direct observation of attosecond light bunching. / Tzallas P. et al. // Nature. 2003. Vol. 426, №6964.

- [115] Математическая энциклопедия. / Виноградов И.М. // Советская энциклопедия. 1977. Т. 1.
- [116] Lehrbuch der kristallphysik (mit ausschluss der kristalloptik) / Voigt W. // Leipzig. Berlin. B.G. Teubner. 1910.
- [117] Heat transport enhanced by optical phonons in one-dimensional anharmonic lattices with alternating bonds. / Xiong D., Zhang Y., Zhao H. // Physical Review E. 2013. Vol. 88, №5.
- [118] Temperature quench echoes in proteins. / Xu D. et al. // The Journal of Chemical Physics. 1995. Vol. 103, №8.
- [119] On the dynamics of necking and fragmentation – I. Real-time and post-mortem observations in Al 6061-O. / Zhang H., Ravi-Chandar K. // International Journal of Fracture. 2007. Vol. 142, №3-4.
- [120] Ашкрофт Н., Мермин Н./ Физика твердого тела. 1979. Т.2. М.: Мир.
- [121] Нестационарные термодиффузионные процессы в конечном одномерном кристалле / Кривцов А. М., Мурачёв А. С., Цветков Д. В. // Чебышевский сб. 2017. Т. 18, №3.
- [122] Точная формула для температуры одномерного кристалла. / Гузев М. А. // Дальневосточный математический журнал. 2018. Т. 18, № 1.
- [123] Динамика тепловых процессов в одномерных гармонических кристаллах. / Кривцов А. М. // Вопросы математической физики и прикладной математики. Материалы семинара, приуроченного к 75-летию проф. Э.А. Троппа. 30 сентября 2015. СПб.: Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе. С. 63–81.
- [124] Кривцов А.М. / Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой. М.: Физматлит. 2007. 304 с.

- [125] Новацкий В. Динамические задачи термоупругости. Пер. с польск. под ред. Г. С. Шапиро, М.: Мир, 1970. 256 с
- [126] Аналитическое описание переходных тепловых процессов в гармонических кристаллах /Кузькин В.А., Кривцов А.М. // Физика твердого тела. 2017. Выпуск 5.
- [127] К вопросу о математическом атомизме Демокрита. / Зубов В.П. // Вестник древней истории. 1951. №4. С. 204–208.