

На правах рукописи



Кузькин Виталий Андреевич

# ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ С МИКРОСТРУКТУРОЙ

01.02.04 — Механика деформируемого твердого тела

## АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени  
доктора физико-математических наук

Научный консультант:  
доктор физ.-мат. наук, чл.-корр. РАН А.М. Кривцов

Санкт-Петербург  
2020

Работа выполнена в лаборатории “Дискретные модели механики” Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института проблем машиноведения Российской академии наук.

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,  
ГЕНДЕЛЬМАН Олег Валерьевич (Израильский технологический институт),

доктор технических наук,  
ЛУРЬЕ Сергей Альбертович (ФГБУН Институт прикладной механики Российской академии наук)

доктор физико-математических наук,  
ШИЛЬКО Евгений Викторович (ФГБУН Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук)

Ведущая организация: ФГБУН Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича Сибирского отделения Российской академии наук.

Защита состоится «\_\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ г. в \_\_\_ часов на заседании совета Д002.075.01 по защите докторских и кандидатских диссертаций при Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте проблем машиноведения Российской академии наук по адресу: 199178, Санкт-Петербург, Большой пр. В.О., 61.

С диссертацией можно ознакомиться в ОНТИ ФГБУН Института проблем машиноведения Российской академии наук.

Автореферат разослан «\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2020 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета Д 002.075.01  
доктор технических наук, профессор

В.В.Дубаренко

## Общая характеристика диссертации

**Актуальность и степень разработанности темы.** Одной из актуальных задач механики деформируемого твердого тела является расчет термоупругих полей в материалах и конструкциях при различных внешних воздействиях. Континуальная теория линейной термоупругости хорошо описывает поведение материалов на макроуровне. В частности, задача об определении поля температуры, вызывающего термоупругие напряжения, на макроуровне в большинстве случаев успешно решается с использованием закона теплопроводности Фурье. Данный закон описывает диффузионный перенос тепловой энергии, типичный для макроскопических систем. Однако эксперименты последних лет, приведенные в работах А. Зеттла, А. Мазнева, К. Нельсона, Дж.А. Роджерса, С. Хубермана и др. показывают, что на микро- и наноуровне тепловая энергия может распространяться волновым образом (баллистически). В частности, показано, что во многих материалах, включая нанопроволоки, углеродные нанотрубки, графен, кремниевые мембраны и др. наблюдаются существенные отклонения от закона Фурье. Теоретическому исследованию данного вопроса посвящены работы С.В. Дмитриева, А. Дхара, С.Н. Гаврилова, О. Гендельмана, М.А. Гузева, Е.А. Корзниковой, Ю.А. Косевича, А.М. Кривцова, Дж. Лебовица, С. Лепри, С.А. Лурье, Р. Ливи, Я. Луккаринена, А. Милке, В. Мюллера, А. Полити, А.В. Порубова, А.В. Савина, Л.И. Слепяна, Г. Спона, Г. Чена, А.Б. Фрейдина, П. Хеммера и других авторов. В такой ситуации актуальность приобретает разработка механических моделей, описывающих термоупругое поведение деформируемых твердых тел с учетом баллистического переноса тепловой энергии. Данная задача особенно важна в связи с развитием микропроцессорной техники и необходимостью отвода тепла от процессоров.

Интерес представляет также решение задач термомеханики, в которых материал находится в существенно неравновесном состоянии. В системах, находящихся в тепловом равновесии, кинетическая энергия, как правило, равно распределена по степеням свободы. Данный факт позволяет описывать тепловое состояние элементарного объема материала с помощью одного скалярного параметра — кинетической температуры, пропорциональной энергии хаотического теплового движения атомов. Вдали от теплового равновесия кинетические энергии, соответствующие различным степеням свободы, могут существенно отличаться. В результате возникает необходимость введения нескольких температур. В частности, известно, что температуры решетки и электронной подсистемы в твердых телах, подверженных лазерному воздействию могут отличаться. Несколько температур также обнаруживается при молекулярно-динамическом моделировании ударных волн и моделировании распространения тепла в сложных кристаллических решетках. Моделированию термомеханического поведения материалов в

сильно неравновесных условиях посвящены работы М.П. Аллена, А.К. Беляева, Т.В. Дудниковой, С.Н. Гаврилова, М.А. Гузева, Д.А. Индейцева, Г. Клейна, А.М. Кривцова, С.А. Кукушкина, Ю.В. Мещерякова, С.А. Лурье, К.Л. Муратикова, Ю.В. Петрова, И. Пригожина, Ю.Н. Радаева, В.В. Стегайлова, В.Е. Фортова, А.Б. Фрейдина и других авторов. При моделировании часто возникает необходимость моделирования процесса выравнивания энергий, соответствующих различным степеням свободы. Для описания данного переходного процесса в рамках многокомпонентных моделей механики сплошных сред требуется построение соответствующих определяющих соотношений.

Для описания термомеханического поведения материала на микро- и наноуровне и построения континуальных определяющих соотношений могут эффективно использоваться дискретные модели деформируемого твердого тела. В частности, большое распространение получили различные вариации метода частиц, например, метод молекулярной динамики. Большой вклад в развитие дискретных методов описания деформируемых тел на микро- и наноуровне внесли работы А.К. Абрамяна, Б.Д. Аннина, Н.М. Бессонова, О.В. Гендельмана, Р.В. Гольдштейна, И.Ф. Головнева, Е.И. Головневой, М.Ю. Гуткина, А.И. Дмитриева, С.В. Дмитриева, К.П. Зольникова, Е.А. Ивановой, С.Н. Коробейникова, А.М. Кривцова, Л.И. Маневича, Н.Ф. Морозова, Г.Э. Нормана, С.Г. Псахье, А.В. Савина, Л.И. Слепяна, В.М. Садовского, В.В. Стегайлова, П.Е. Товстика, В.М. Фомина, В.Е. Фортова, А.Г. Шейнермана, Е.В. Шилько и других авторов. В литературе дискретные методы в основном используются для численного моделирования поведения материалов на различных масштабных уровнях. Аналитические методы исследования дискретных моделей деформируемого твердого тела нуждаются в дальнейшем развитии, которому и посвящена настоящая работа.

**Цель** работы состоит в развитии подходов к аналитическому описанию термомеханических процессов в кристаллических твердых телах. Для достижения поставленной цели решаются следующие **задачи**:

- Разработка подходов к описанию процессов термоупругого деформирования и волнового переноса энергии в кристаллических твердых телах на микро- и наноуровне.
- Развитие подхода к получению определяющих уравнений, описывающих термоупругое поведение кристаллических твердых тел.
- Демонстрация эффективности предлагаемых подходов посредством решения задач, исследование которых представляет самостоятельный интерес.

**Методы исследования.** Основным методом исследования, используемым в данной работе для описания термоупругого деформирования кристалличе-

ских твердых тел, является метод динамики частиц. В работе рассматриваются линейные и нелинейные законы взаимодействия между частицами. В случае линейных взаимодействий задачи решаются аналитически с использованием дискретного преобразования Фурье или разложения по собственным формам. Для исследования полученных аналитических решений используются методы асимптотического анализа интегралов, такие как метод стационарной фазы. В большинстве задач производится переход от дискретного описания к континуальному. Для этого проводится континуализация по пространственной переменной. Также используется метод разделения механических и тепловых движений частиц деформируемого твердого тела. Для вывода определяющих соотношений используется подход, основанный на разложении определяющих параметров в ряд по малым величинам, характеризующим тепловое движение частиц. Для численного решения задач используются симплектические методы интегрирования Верле и Кэнди-Розмуса.

**Теоретическая и практическая значимость диссертации.** Работа имеет теоретический характер. Развиваемые подходы могут послужить для расчета полей термоупругих напряжений и температуры в кристаллических твердых телах, содержащих малое число дефектов. Подход, предложенный в главе 1, может использоваться при решении задач упругости и прочности материалов и конструкций на наноуровне. Подход, развиваемый в главе 2, может использоваться при построении определяющих соотношений для многокомпонентных моделей механики сплошной среды при описании поведения кристаллических материалов в сильно неравновесных условиях, например, при лазерном воздействии. Подход, развиваемый в главе 3, может использоваться при описании переноса энергии случайных колебаний в кристаллических твердых телах и метаматериалах. В частности, получаемые результаты могут использоваться для моделирования баллистического переноса тепловой энергии в кристаллах и описания отвода тепла на наноуровне. Подход, развиваемый в главе 4, позволяет получать новые определяющие соотношения, которые могут использоваться при описании термоупругого поведения твердых тел.

**Достоверность** полученных результатов достигается за счет строгой математической постановки задач, применения математически обоснованных методов решения, сравнения аналитических выкладок с результатами численного моделирования.

**Научную новизну** составляют следующие **результаты, выносимые на защиту**:

1. Предложен подход, позволяющий описывать влияние вакансий на упругие и прочностные свойства кристаллов. Получено точное аналитическое решение задачи о деформировании двумерной треугольной кристаллической ре-

шетки с двояко-периодической системой вакансий. Показано, что влияние вакансий на эффективные упругие свойства может быть описано в рамках линейной теории упругости, в то время как концентрация деформаций вблизи вакансии существенно отличается от результатов, получающихся в континуальной теории.

2. Развита методика к описанию переходных процессов в кристаллических твердых телах с произвольной сложной решеткой в линейном приближении. Получено точное аналитическое решение, описывающее уравнивание кинетической и потенциальной энергий и перераспределение кинетической энергии по степеням свободы элементарной ячейки. Получена формула, связывающая стационарные значения кинетических энергий, соответствующих степеням свободы элементарной ячейки, с начальными условиями. На примере двухатомной цепочки, двумерной треугольной решетки и решетки графена показано, что полученные формулы с высокой точностью описывают результаты численного решения уравнений динамики.
3. Развита методика к континуальному описанию переноса энергии в кристаллических твердых телах с произвольной сложной решеткой в линейном приближении. Выведена формула, описывающая изменение во времени начального поля кинетической энергии в бесконечном кристалле. Аналитически и численно решен ряд задач о переносе энергии в двухатомной цепочке, квадратной решетке и решетке графена. Показано, в частности, что в процессе переноса кинетические энергии подрешеток двухатомной цепочки отличаются. В решетке графена перенос энергии существенно анизотропен.
4. Развита методика к описанию термоупругого поведения кристаллических твердых тел с баллистическим переносом тепловой энергии. Аналитически и численно решена задача термоупругости для цепочки Ферми-Паста-Улама с начальным периодическим распределением температуры. Показано, что в данной задаче возникает резонанс, вызванный совпадением частот колебаний температурного поля с собственными частотами механических колебаний системы. Численно показано, что механические колебания, возникающие за счет резонанса, затухают монотонно. Эффект возвращения, характерный для данной системы при отсутствии теплового движения, при конечной температуре не наблюдается.
5. Развита методика к получению определяющих соотношений, связывающих в адиабатическом приближении напряжения, объем и тепловую энергию при термоупругом деформировании кристалла. Получены линейные и нелинейные определяющие соотношения для цепочки, совершающей продольные и

поперечные колебания, и идеальных кристаллов простой структуры с парными взаимодействиями. Показано, что при некоторых деформациях цепочки зависимость тепловых напряжений от тепловой энергии становится существенно нелинейной.

**Апробация работы.** Результаты, полученные в диссертации, представлялись на ежегодных летних конференциях “Актуальные проблемы механики” (С.-Петербург, 2012, 2013, 2014, 2015, 2016, 2017, 2018, 2019, 2020); на международных конференциях 5th International Conference Auxetics and other materials and models with "negative" characteristics (Познань, Польша, 2014); Advances in Micromechanics of Materials (Жешув, Польша, 2014); Recent Advances in Numerical Simulation of Hydraulic Fracture (Жешув, Польша, 2014); Non-Equilibrium Simulation Conference (NESC) (Шеффилд, Великобритания, 2016); на Всероссийском съезде по теоретической и прикладной механике (Уфа, 2019); на семинаре института твердотельных процессов и технологии частиц, технического университета Гамбурга (Гамбург, Германия, 2011); семинаре кафедры химической инженерии университета Бригама-Янга (Прово, США, 2013); семинарах кафедры математического моделирования технического университета Жешува (Жешув, Польша, 2012, 2013, 2014); семинарах университета Лунда (Лунд, Швеция, 2016, 2018); семинаре кафедры физики университета Абердина (Абердин, Великобритания, 2017); семинаре института гидродинамики им. М.А. Лаврентьева (Новосибирск, 2015); семинаре кафедры “Механика и процессы управления” Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого (С.-Петербург, 2015).

Результаты диссертации представлялись на заседании бюро отделения энергетики, машиностроения, механики и процессов управления РАН (академик-секретарь В.Е. Фортов); семинаре Института механики МГУ (руководитель семинара — академик РАН И.Г. Горячева); семинаре академика Н.Ф. Морозова; Санкт-Петербургском городском семинаре по механике (руководитель семинара — чл.-корр. РАН Д.А. Индейцев); семинаре высшей школы теоретической механики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого (руководитель семинара — чл.-корр. РАН А.М. Кривцов); семинаре математического института имени С.М. Никольского российского университета дружбы народов (руководитель семинара — д.ф.-м.н. А.Л. Скубачевский); семинаре Лаборатория физики и механики полимеров института химической физики им. Н.Н. Семенова РАН (руководитель семинара — д.ф.-м.н. Л.И. Маневич).

Большая часть работы выполнена при поддержке грантов российского научного фонда (№ 14-11-00599, № 17-71-10213 и № 18-11-00201) и российского фонда фундаментальных исследований (14-01-00802, 14-01-00845, 16-29-15121, 19-01-00633, 20-37-70058).

**Публикации по теме диссертации, полнота изложения материала.** Результаты диссертации опубликованы в полном объеме в 17 работах (из них 4 — без соавторов) в изданиях, рекомендованных ВАК России и/или входящих в международные базы цитирования Web of Science или Scopus. Список работ приведен в конце автореферата. В большинстве работ, выполненных в соавторстве, соискателю принадлежит математическая постановка и решение задач.

**Структура и объем диссертации.** Диссертация изложена на 312 страницах и состоит из введения, четырех глав, заключения и списка использованной литературы. Диссертация содержит 61 рисунок. Библиография включает 262 наименования.

## Краткое содержание диссертации

**Во введении** обосновываются актуальность, научная новизна, теоретическая и практическая значимость работы, приводится краткое описание используемых методов.

**В главе 1** предлагается подход к описанию упругого деформирования кристаллических твердых тел с вакансиями. Выкладки проводятся на примере двумерной треугольной решетки. Задачи о деформировании решетки с вакансиями решаются аналитически и численно. В аналитических выкладках рассматривается двояко-периодическая система вакансий. Вакансия моделируется за счет введения дополнительных связей с отрицательной жесткостью. Определяется точное поле перемещений в решетке при двухосном деформировании. Исследуется влияние вакансий на эффективные упругие и прочностные свойства решетки. Проводится сравнение с результатами численного решения задач о деформировании решетки со случайным распределением вакансий и с решением ряда задач линейной теории упругости. Делаются выводы о применимости континуальных методов для описания полей перемещений, создаваемых вакансиями, а также влияния вакансий на эффективные упругие свойства кристаллов.

**В параграфе 1.1** приводится обзор литературы по дискретным и континуальным методам описания упругости кристаллов на наноуровне. Рассматриваются подходы к вычислению полей напряжений, создаваемых дефектами, в континуальной и дискретной постановках. Особое внимание уделяется аналитическим методам определения полей напряжений.

**В параграфе 1.2** выводятся уравнения равновесия для треугольной решетки с двояко-периодической системой вакансий под воздействием нагрузки, приложенной на бесконечности. Ячейка периодичности показана на рис. 1. Вводятся индексы  $n, m$ , нумерующие частицы таким образом, что радиус-векторы частиц ячейки периодичности имеют вид  $\mathbf{r}^{n,m} = a(n\mathbf{e}_u + m\mathbf{e}_v)$ , где  $\mathbf{e}_u, \mathbf{e}_v$  — базис-



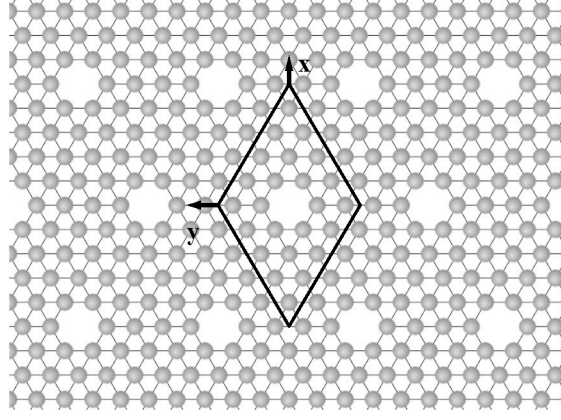


Рис. 1: Треугольная решетка с двояко-периодической системой вакансий. Сплошная линия ограничивает ячейку периодичности.

ные векторы решетки. Каждая частица взаимодействует только с ближайшими соседями посредством линейных сил. Для того, чтобы записать уравнения равновесия решетки в виде одного разностного уравнения, вводятся связи с отрицательными жесткостями.

**В параграфе 1.3** уравнения равновесия решетки с вакансиями решаются аналитически. Вводится средний тензор деформации ячейки периодичности  $\boldsymbol{\varepsilon}$ , получающийся в результате воздействия на решетку нагрузок, приложенных на бесконечности. Перемещения частиц представляются в виде суммы двояко-периодической части  $\tilde{\mathbf{u}}^{n,m}$  и линейной функции тензора деформации  $\boldsymbol{\varepsilon}$ :

$$\mathbf{u}^{n,m} = \tilde{\mathbf{u}}^{n,m} + a\boldsymbol{\varepsilon} \cdot (n\mathbf{e}_u + m\mathbf{e}_v), \quad \tilde{\mathbf{u}}^{n+\alpha(2N+1),m+\beta(2N+1)} = \tilde{\mathbf{u}}^{n,m}, \quad (1)$$

где  $\alpha$  и  $\beta$  — целые числа,  $2N + 1$  — число частиц вдоль стороны ячейки. Подстановка (1) в уравнения равновесия дает уравнения для двояко-периодической части перемещений  $\tilde{\mathbf{u}}^{n,m}$ . Решение данных уравнений с использованием дискретного преобразования Фурье дает точное поле перемещений в двояко-периодической задаче.

При объемном деформировании ячейки периодичности точное поле переме-

щений имеет вид:

$$\begin{aligned}
u^{n,m} = v^{m,n} &= a\varepsilon \left( n - \frac{m}{2} - \frac{G^{n,m}}{1 + G^{1,0}} \right), \quad u^{n,m} = \mathbf{u}^{n,m} \cdot \mathbf{e}_u, \quad v^{n,m} = \mathbf{u}^{n,m} \cdot \mathbf{e}_v, \\
G^{n,m} &= \frac{1}{2(2N+1)^2} \sum_{s,p=-N}^N g(s\theta, p\theta) \sin((sn + pm)\theta), \quad \theta = \frac{2\pi}{2N+1}, \\
g(x, y) &= \frac{\sin y \sin^2 \frac{x}{2} - \sin x \sin^2 \frac{x+y}{2}}{\sin^2 \frac{x}{2} \sin^2 \frac{y}{2} + \sin^2 \frac{x}{2} \sin^2 \frac{x+y}{2} + \sin^2 \frac{y}{2} \sin^2 \frac{x+y}{2}}.
\end{aligned} \tag{2}$$

Формула (2) дает, в частности, перемещение  $u^{1,0}$  частицы, соседней с вакансией. В случае бесконечной ячейки  $u_{\infty}^{1,0} \approx 1.642a\varepsilon$ , где  $a\varepsilon$  — перемещение той же частицы в кристалле без вакансии.

Результаты, полученные с использованием дискретной модели, сравниваются с решением похожей задачи континуальной теории упругости. Поле перемещений в пластине с коэффициентом Пуассона  $\nu_0 = 1/3$ , содержащей круговое отверстие радиуса  $R$ , нагруженной приложенным на бесконечности напряжением  $\sigma_0$  имеет вид (задача Кирша)

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{e}_r = \varepsilon r + 2 \frac{\varepsilon R^2}{r}, \quad \varepsilon = \frac{\sigma_0}{2K_0}, \tag{3}$$

где  $r$  — расстояние от центра отверстия,  $\mathbf{e}_r = \mathbf{r}/r$ ,  $K_0$  — модуль объемного сжатия. Перемещения частиц в решетке представляются в аналогичном виде:

$$\mathbf{u}^{n,m} \cdot \mathbf{e}_r = \varepsilon r + \tilde{\mathbf{u}}^{n,m} \cdot \mathbf{e}_r. \tag{4}$$

Первое слагаемое в формуле (3) совпадает с аналогичным континуальным выражением (4). Рис. 2 показывает зависимость радиальной компоненты  $\tilde{\mathbf{u}}^{n,m} \cdot \mathbf{e}_r$  от безразмерного расстояния  $r/a$  до центра вакансии при  $N = 100$ . Круги показывают аналитическое решение дискретной задачи. Линии показывают аналогичные континуальные зависимости. Видно, что при  $r/a > 10$  перемещения частиц хорошо описываются континуальной теорией. Сравнение также позволяет определить эффективный радиус вакансии  $R \approx 0.55a$ . Основное отличие дискретного и континуального решений состоит в том, что в окрестности вакансии дискретное решение ведет себя немонотонно.

Также выводится точная формула для поля перемещений при двухосном деформировании ячейки периодичности, которая далее используются для вычисления эффективных упругих модулей и коэффициентов концентрации.

**В параграфе 1.4** с использованием полученного выше поля перемещений

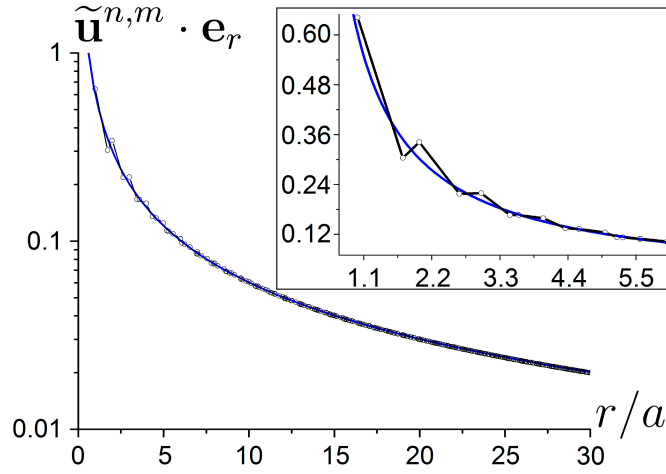


Рис. 2: Радиальная часть перемещения ( $\tilde{\mathbf{u}}^{n,m} \cdot \mathbf{e}_r$ ) частиц в треугольной решетке с вакансией при объемном деформировании ( $N = 100$ ).

исследуется влияние периодического распределения вакансий на эффективные упругие модули решетки. С использованием закона Гука упругие модули выражаются через средний вектор напряжений, равный средней силе на границе ячейки периодичности.

**В параграфе 1.5** эффективные упругие модули треугольной решетки со случайным распределением вакансий вычисляются на основе молекулярно-динамического моделирования. Рассматривается квадратная ячейка периодичности, содержащая большое число вакансий (рис. 3). В начальный момент времени

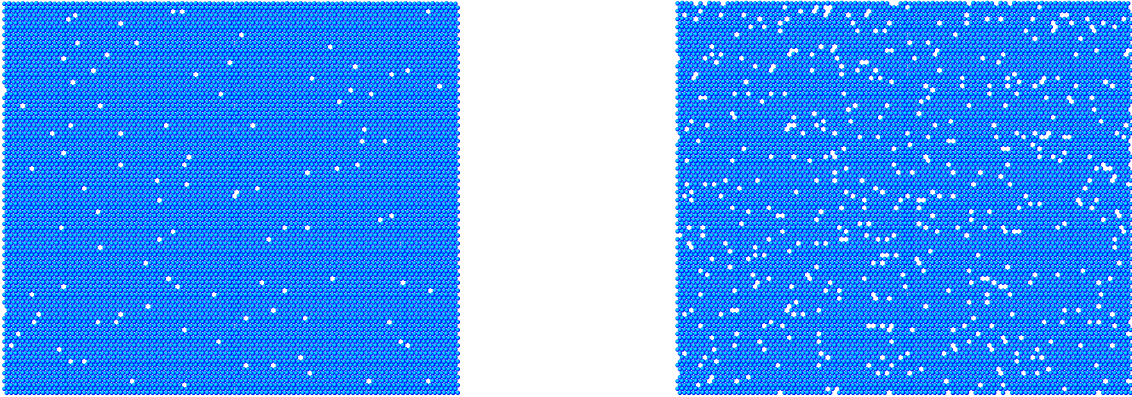


Рис. 3: Треугольная решетка со случайным распределением вакансий ( $p = 0.01$  и  $p = 0.05$ ). Пористость определяется как число удаленных частиц, отнесенное к полному числу частиц в образце.

на ячейку периодичности накладывается однородная деформация. Упругие модули вычисляются с использованием закона Гука. Значения эффективных упру-

гих модулей приведены на рис. 4. При малых значениях пористости эффективные упругие модули решетки со случайным и периодическим распределениями вакансий практически совпадают. При увеличении пористости упругие взаимодействия между вакансиями приводят к тому, что решетка с периодическим распределением вакансий становится более жесткой, чем со случайным.

**В параграфе 1.6** рассматривается вопрос о возможности замены решетки с вакансиями двумерной сплошной средой с отверстиями с точки зрения эффективных упругих модулей и коэффициентов концентрации. Определяется эффективная форма данных отверстий.

Эффективные упругие модули двумерной сплошной среды с отверстиями в приближении невзаимодействия вычисляются по формулам (см. работы М.Л. Качанова, Р. Циммермана):

$$E = \frac{E_0}{1 + 2h_1p}, \quad \nu = \frac{\nu_0 + 2h_2p}{1 + 2h_1p}, \quad (5)$$

где  $E_0, \nu_0$  — упругие модули материала без вакансий;  $h_1, h_2$  — факторы формы. Формулы (5) используются для аппроксимации зависимости упругих модулей от пористости (см. рис. 4). В случае, если факторы формы берутся такими

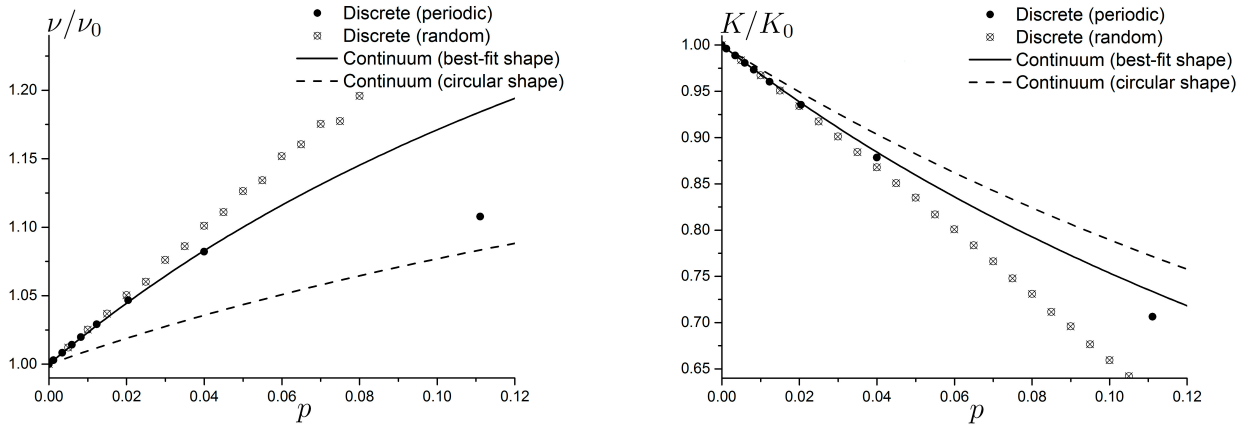


Рис. 4: Зависимость упругих модулей от пористости для треугольной решетки с двояко-периодическим (точки) и случайным (крестики) распределением вакансий. Линии — расчеты по формуле (5) при наилучшем выборе факторов формы пор (сплошная) и круглых порах (пунктирная).

же как для круглых форм, получается существенное отличие от результатов дискретного моделирования. Наилучшее соответствие результатов расчетов по дискретным и континуальным моделям получается при  $h_1 = 2.036$ ,  $h_2 = 0.810$ .

Рассматривается вопрос о концентрации деформаций вблизи вакансий. Коэффициент концентрации деформаций определяется как отношение максимальной деформации связи, близкой к вакансии, к максимальной деформации связей

на бесконечности. В случае объемного деформирования, максимальное значение деформации достигается в связях, окружающих вакансию (коэффициент концентрации равен 1.642). При одноосном деформировании в горизонтальном и вертикальном направлениях коэффициенты концентрации получаются равными 1.282 и 1.449 соответственно. Во всех приведенных случаях коэффициенты концентрации заметно ниже, чем в соответствующих континуальных задачах теории упругости.

**В главе 2** рассматриваются переходные процессы, происходящих в упругих твердых телах с кристаллической структурой. В качестве модели деформируемого твердого тела используется бесконечная идеальная кристаллическая решетка простой или сложной структуры. Для задания начального неравновесного состояния частицам сообщаются случайные скорости и нулевые перемещения. При этом кинетическая энергия, вообще говоря, неравным образом распределена по степеням свободы. Исследуется два переходных процесса: перераспределение энергии по степеням свободы и уравнивание кинетической и потенциальной энергий. Выводятся формулы, описывающие изменение кинетических энергий, соответствующих различным степеням свободы. Проводится сравнение с результатами численного решения уравнений динамики. Численно исследуется влияние малой нелинейности на вышеупомянутые переходные процессы. Полученные результаты могут использоваться, например, при построении определяющих соотношений для многокомпонентных моделей механики сплошных сред (в т.ч. для описания лазерного воздействия на деформируемое твердое тело).

**В параграфе 2.1** приводится обзор литературы по моделированию переходных процессов в упругих твердых телах с кристаллической структурой.

**В параграфе 2.2** исследуются переходные процессы в упругих телах с простой кристаллической решеткой, каждая частица которой имеет одну степень свободы. Уравнения динамики записываются в виде:

$$\ddot{u}(\mathbf{x}) = D_x u(\mathbf{x}), \quad D_x u(\mathbf{x}) = \omega_*^2 \sum_{\alpha} b_{\alpha} u(\mathbf{x} + \mathbf{a}_{\alpha}), \quad b_{\alpha} = b_{-\alpha}, \quad (6)$$

где  $u(\mathbf{x})$  — перемещение частицы с радиус-вектором  $\mathbf{x}$ ;  $\omega_*$  — характерная частота;  $\mathbf{a}_{\alpha} = \mathbf{a}_{-\alpha}$  — вектор, соединяющий частицу с ее соседом  $\alpha$ ; суммирование ведется по всем соседям. Подбор параметров  $\mathbf{a}_{\alpha}$  и  $b_{\alpha}$  в уравнении (6) позволяет описывать линейризованные колебания одномерных и двумерных решеток с парными и многочастичными взаимодействиями. Уравнения динамики (6) дополняются периодическими граничными условиями по всем пространственным направлениям. В аналитических выкладках рассматривается предельный случай, когда размер ячейки периодичности стремится к бесконечности.

Для задания начального неравновесного состояния деформируемого твердого тела используются стохастические начальные условия:

$$u(\mathbf{x}) = 0, \quad v(\mathbf{x}) = v_0(\mathbf{x}), \quad (7)$$

где  $v = \dot{u}$ ;  $v_0(\mathbf{x})$  — некоррелированные случайные величины с нулевым математическим ожиданием. Рассматривается пространственно однородное состояние кристалла, при котором дисперсия начальных скоростей не зависит от  $\mathbf{x}$ . Показано, что при начальных условиях (7) математические ожидания энергий, приходящихся на собственные формы системы, равны.

Уравнениям динамики (6) соответствует дисперсионное соотношение:

$$\omega^2(\mathbf{k}) = -\omega_*^2 \left( b_0 + 2 \sum_{\alpha>0} b_\alpha \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_\alpha) \right), \quad \mathbf{k} = \frac{1}{a} \sum_{j=1}^d p_j \tilde{\mathbf{e}}_j, \quad (8)$$

где  $\mathbf{k}$  — волновой вектор,  $\tilde{\mathbf{e}}_j$  — векторы базиса, обратного к базису решетки.

Выводится уравнение, описывающее изменение кинетической и потенциальной энергий в кристалле (6) с начальными условиями (7). Рассматривается бесконечное множество реализаций, отличающихся случайными начальными условиями. Вводится обобщенная кинетическая энергия  $K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = M \langle v(\mathbf{x})v(\mathbf{y}) \rangle / 2$  для частиц с радиус-векторами  $\mathbf{x}$  и  $\mathbf{y}$ . Здесь и далее угловыми скобками  $\langle \dots \rangle$  обозначается математическое ожидание. Для  $K(\mathbf{x}, \mathbf{y})$  формулируется начальная задача:

$$\ddot{K} - 2(D_x + D_y) \dot{K} + (D_x - D_y)^2 K = 0, \quad D_x K = \omega_*^2 \sum_{\alpha} b_\alpha K(\mathbf{x} + \mathbf{a}_\alpha, \mathbf{y}), \quad (9)$$

$$K = T_0 \delta_D(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad \dot{K} = 0, \quad \ddot{K} = T_0 (D_x + D_y) \delta_D(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad \ddot{K} = 0, \quad (10)$$

где  $T_0 = \frac{M}{2} \langle v_0(\mathbf{x})^2 \rangle$ ;  $\delta_D(0) = 1$ ,  $\delta_D(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = 0$  при  $\mathbf{x} \neq \mathbf{y}$ .

Детерминированная начальная задача (9), (10) решается с использованием дискретного преобразования Фурье. Решение дает, в частности, точную формулу, описывающую изменение кинетической энергии в решетках (6):

$$T = \frac{T_0}{2} \left[ 1 + \int_{\mathbf{k}} \cos(2\omega(\mathbf{k})t) d\mathbf{k} \right], \quad \int_{\mathbf{k}} \dots d\mathbf{k} = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_0^{2\pi} \dots \int_0^{2\pi} \dots dp_1 \dots dp_d. \quad (11)$$

Видно, что поведение кинетической энергии определяется видом дисперсионного соотношения. Анализ формулы (11) показывает, что кинетическая энергия

совершает высокочастотные колебания, связанные с перераспределением энергии между кинетической и потенциальной. С течением времени энергии выравниваются и кинетическая энергия стремится к половине своего начального значения.

Формула (11) используется для описания переходных процессов в нескольких одномерных и двумерных скалярных решетках. В частности, рассматривается цепочка, состоящая из одинаковых частиц, соединенных линейными пружинками. Для данной системы формула (11) совпадает с результатами, полученным другими способами в работах И. Пригожина и А.М. Кривцова.

Также рассматривается изменение кинетической энергии в растянутой квадратной решетке, совершающей поперечные колебания. Частицы соединены с ближайшими соседями линейными пружинками. Уравнения динамики записываются в виде (6) со следующими параметрами:

$$\omega_* = \sqrt{\frac{F}{Ma}}, \quad b_{\pm 1} = b_{\pm 2} = 1, \quad b_0 = -4, \quad \mathbf{a}_{\pm 1} = \pm a\mathbf{i}, \quad \mathbf{a}_{\pm 2} = \pm a\mathbf{j}, \quad (12)$$

где  $F$  — сила предварительного натяжения,  $M$  — масса частицы. Дисперсионное соотношение для данной решетки имеет вид

$$\omega = 2\omega_* \sqrt{\sin^2(p_1/2) + \sin^2(p_2/2)}, \quad \mathbf{ka} = p_1\mathbf{i} + p_2\mathbf{j}. \quad (13)$$

Колебания кинетической энергии описываются формулами (11), (13). Расчеты по данным формулам хорошо согласуются с результатами численного решения уравнений динамики (см. рис. 5). Осцилляции, вызванные выравниванием кинетической и потенциальной энергий затухают со временем как  $1/t$ .

Аналогичные результаты получаются для растянутой треугольной решетки, совершающей поперечные колебания.

**В параграфе 2.3** проводится обобщение подхода, развитого в **параграфе 2.2** на случай упругих твердых телах, элементарная ячейка которых имеет  $N$  степеней свободы. Уравнения динамики ячейки с радиус-вектором  $\mathbf{x}$  записываются в виде:

$$\mathbf{M}\dot{\mathbf{v}}(\mathbf{x}) = \mathbf{D}_x\mathbf{u}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{D}_x\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \sum_{\alpha} \mathbf{C}_{\alpha}\mathbf{u}(\mathbf{x} + \mathbf{a}_{\alpha}), \quad \mathbf{C}_{\alpha} = \mathbf{C}_{-\alpha}^{\top}, \quad (14)$$

где  $\mathbf{u}(\mathbf{x}) = (u_1, u_2, \dots, u_N)^{\top}$  — столбец из компонент перемещений частиц ячейки;  $\mathbf{v}(\mathbf{x}) = \dot{\mathbf{u}}(\mathbf{x})$ ;  $\top$  — знак транспонирования;  $\mathbf{M}$  — диагональная матрица, составленная из масс частиц; элементы матрицы  $\mathbf{C}_{\alpha}$  определяют вклад ячейки  $\alpha$  в суммарную силу, действующую на ячейку  $\mathbf{x}$ . Суммирование ведется по

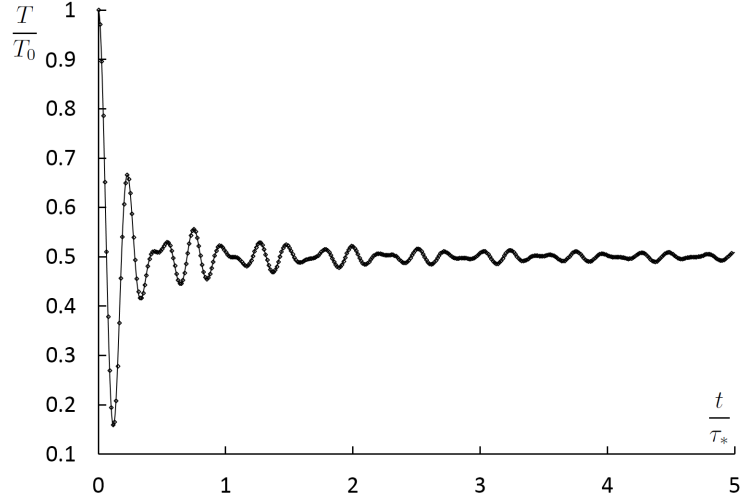


Рис. 5: Осцилляции кинетической энергии в растянутой квадратной решетке. Формулы (11),(13) (линия) и численное решение уравнений динамики (точки).

всем соседним элементарным ячейкам  $\alpha$ . Уравнения динамики (14) решаются с периодическими граничными условиями и начальными условиями:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = 0, \quad \mathbf{v}(\mathbf{x}) = \mathbf{v}_0(\mathbf{x}), \quad (15)$$

где  $\mathbf{v}_0(\mathbf{x})$  — независимые случайные векторы с нулевым математическим ожиданием, дисперсия  $\mathbf{v}_0$  не зависит от  $\mathbf{x}$ .

Выводится формула для динамической матрицы  $\mathbf{\Omega}(\mathbf{k})$ , собственные числа которой дают квадраты частот, соответствующих волновому вектору  $\mathbf{k}$ :

$$\mathbf{\Omega} = - \sum_{\alpha} \mathbf{M}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{C}_{\alpha} \mathbf{M}^{-\frac{1}{2}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_{\alpha}}. \quad (16)$$

Доказывается, что матрица  $\mathbf{\Omega}$  является эрмитовой.

Рассматривается бесконечное множество реализаций системы (14) со случайными начальными условиями (15). Вводится обобщенная кинетическая энергия  $\mathbf{K}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$  и матрица  $\mathbf{T}(\mathbf{x})$ , диагональные элементы которой равны математическим ожиданиям кинетических энергий, соответствующих степеням свободы элементарной ячейки:

$$\mathbf{K}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{1}{2} \mathbf{M}^{\frac{1}{2}} \langle \mathbf{v}(\mathbf{x}) \mathbf{v}(\mathbf{y})^{\top} \rangle \mathbf{M}^{\frac{1}{2}}, \quad \mathbf{T}(\mathbf{x}) = \mathbf{K}(\mathbf{x}, \mathbf{x}). \quad (17)$$

Поведение обобщенных кинетических энергий  $\mathbf{K}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$  описывается начальной



задачей:

$$\begin{aligned} \ddot{\mathbf{K}} - 2 \left( \mathbf{D}\ddot{\mathbf{K}} + \ddot{\mathbf{K}}\mathbf{D} \right) + \mathbf{D}^2\mathbf{K} - 2\mathbf{D}\mathbf{K}\mathbf{D} + \mathbf{K}\mathbf{D}^2 &= 0, \\ \mathbf{D}\mathbf{K} &= \sum_{\alpha} \mathbf{M}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{C}_{\alpha} \mathbf{M}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{K} (\mathbf{x} - \mathbf{y} + \mathbf{a}_{\alpha}), \end{aligned} \quad (18)$$

$$\mathbf{K} = \mathbf{K}_0 = \mathbf{T}_0 \delta_D(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad \dot{\mathbf{K}} = 0, \quad \ddot{\mathbf{K}} = \mathbf{D}\mathbf{K}_0 + \mathbf{K}_0\mathbf{D}, \quad \ddot{\dot{\mathbf{K}}} = 0, \quad (19)$$

где  $\mathbf{T}_0$  — постоянная матрица, определяющая начальное распределение кинетической энергии по степеням свободы элементарной ячейки. Решение задачи (18), (19), дает, в частности, точное выражение для матрицы  $\mathbf{T}$ :

$$\mathbf{T} = \int_{\mathbf{k}} \mathbf{P}\mathbf{T}'\mathbf{P}^{*\top} d\mathbf{k}, \quad T'_{ij} = \frac{1}{2} \{ \mathbf{P}^{*\top} \mathbf{T}_0 \mathbf{P} \}_{ij} [\cos((\omega_i - \omega_j)t) + \cos((\omega_i + \omega_j)t)]. \quad (20)$$

Здесь  $\{...\}_{ij}$  — элемент матрицы с индексами  $i, j$ ;  $\omega_i(\mathbf{k}) \geq 0, i = 1, \dots, N$ ; матрица  $\mathbf{P}$  состоит из нормированных собственных векторов динамической матрицы; интеграл по  $\mathbf{k}$  определен формулой (11). В случае, когда начальная энергия равно распределена по степеням свободы, выполняется:

$$T = \frac{1}{N} \text{tr} \mathbf{T} = \frac{T_0}{2} \left[ 1 + \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \int_{\mathbf{k}} \cos(2\omega_j(\mathbf{k})t) d\mathbf{k} \right], \quad T_0 = \frac{1}{N} \text{tr} \mathbf{T}_0. \quad (21)$$

Формула (20) описывает два переходных процесса: выравнивание кинетической и потенциальной энергий и перераспределение кинетической энергии по степеням свободы элементарной ячейки.

На больших временах кинетические энергии, соответствующие степеням свободы элементарной ячейки, в случае бесконечного кристалла стремятся к стационарным значениям, определяемым формулой:

$$\mathbf{T}_{eq} = \frac{1}{2N} \text{tr} \mathbf{T}_0 \mathbf{E} + \frac{1}{2} \int_{\mathbf{k}} \mathbf{P} \text{diag} (\mathbf{P}^{*\top} \text{dev} \mathbf{T}_0 \mathbf{P}) \mathbf{P}^{*\top} d\mathbf{k}, \quad (22)$$

где  $\mathbf{E}$  — единичная матрица. Формула (22) показывает, что в общем случае стационарные значения кинетических энергий различны. Если начальные кинетические энергии равны, то они также равны в стационарном состоянии.

Формулы (20), (22) применяются для описания переходных процессов в цепочке с чередующимися массами и жесткостями, треугольной решетке и решетке графена.

Рассматривается цепочка, состоящая из чередующихся частиц масс  $m_1$  и  $m_2$ ,

соединенных пружинками с чередующимися жесткостями  $c_1$  и  $c_2$ . Уравнения динамики являются частным случаем (14) со следующими значениями матриц  $\mathbf{M}$ ,  $\mathbf{C}_\alpha$ :

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} m_1 & 0 \\ 0 & m_2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{C}_1 = \mathbf{C}_{-1}^\top = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ c_2 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{C}_0 = \begin{bmatrix} -c_1 - c_2 & c_1 \\ c_1 & -c_1 - c_2 \end{bmatrix}. \quad (23)$$

Колебания кинетической энергии в цепочке описываются формулой:

$$T = \frac{T_0}{2} + T_{ac} + T_{op}, \quad T_{ac} = \frac{T_0}{8\pi} \int_0^{2\pi} \cos(2\omega_2 t) dp, \quad T_{op} = \frac{T_0}{8\pi} \int_0^{2\pi} \cos(2\omega_1 t) dp, \quad (24)$$

где  $T_0$  — начальная кинетическая энергия;  $\omega_j(p)$ ,  $j = 1, 2$  — дисперсионное соотношение. Расчеты по формуле (24) согласуются с результатами численного решения уравнений динамики (см. рис. 6А). Величины  $T_{ac}$ ,  $T_{op}$ , определяющие вклады акустических и оптических колебаний, показаны на рис. 6В. Видно, что вклад оптической ветки имеет форму биений, а вклад акустической — имеет одну характерную частоту. С использованием метода стационарной фазы показано, что частоты колебаний энергии принадлежат спектру цепочки, а соответствующие групповые скорости равны нулю.

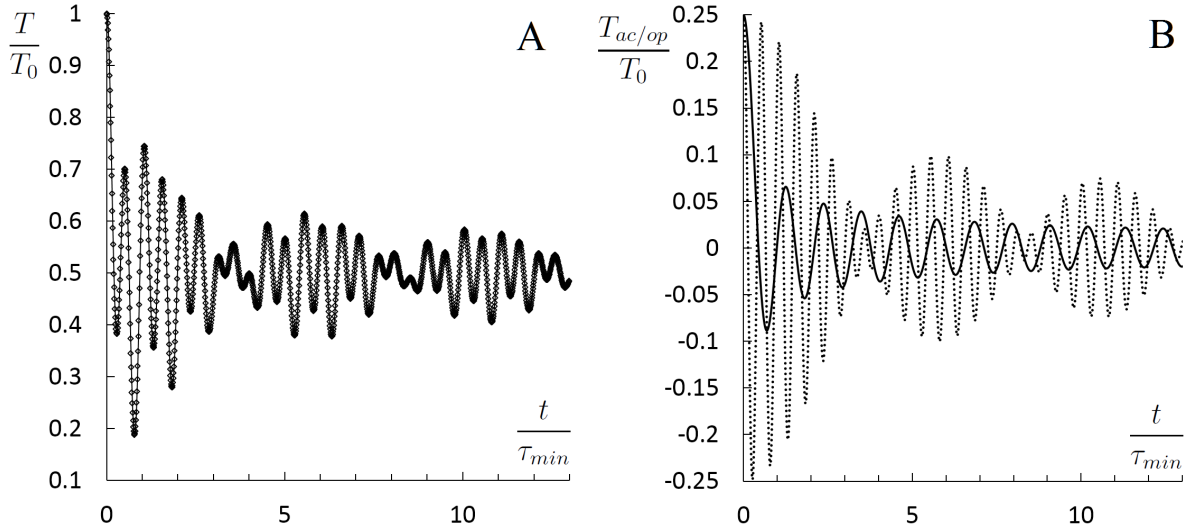


Рис. 6: А. Колебания кинетической энергии в цепочке ( $m_2 = 4m_1$ ,  $c_1 = c_2$ ). Начальные энергии подрешеток равны. Сплошная линия — аналитическое решение (24), точки — численное решение. В. Вклады акустических ( $T_{ac}$ , сплошная линия) и оптических ( $T_{op}$ , точки) веток.

С использованием формулы (22) вычисляются кинетические энергии масс  $m_1$ ,

$m_2$  в стационарном состоянии. Результаты вычислений в пределах погрешности расчетов неотличимы от результатов численного решения уравнений динамики (см. рис. 7). Показано, в частности, что энергии подрешеток уравниваются только в случае  $m_1 = m_2$ .

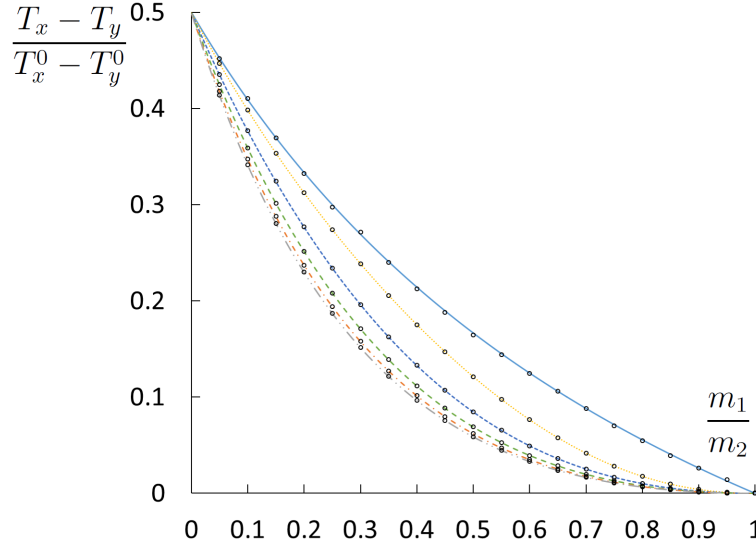


Рис. 7: Стационарные значения кинетических энергий подрешеток в двухатомной цепочке при  $\frac{c_1}{c_2} = 1$  (сплошная линия);  $\frac{1}{2}$  (точки);  $\frac{1}{4}$  (короткий пунктир);  $\frac{1}{8}$  (пунктир);  $\frac{1}{16}$  (штрих-пунктир);  $\frac{1}{32}$  (штрих-пунктир с двумя точками).

Рассматриваются переходные процессы, происходящие в растянутой решетке графена, совершающей только поперечные колебания. Частицы соединены с ближайшими соседями предварительно растянутыми пружинками. Уравнение динамики является частным случаем формулы (14) со следующими значениями матриц  $\mathbf{M}$ ,  $\mathbf{C}_\alpha$ :

$$\mathbf{C}_0 = \begin{bmatrix} -3c & c \\ c & -3c \end{bmatrix}, \quad \mathbf{C}_1 = \mathbf{C}_2 = \mathbf{C}_{-1}^\top = \mathbf{C}_{-2}^\top = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ c & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{M} = M\mathbf{E}, \quad (25)$$

где  $c$  — жесткость, определяемая предварительным натяжением графена. Строится дисперсионное соотношение для данной решетки:

$$\omega^2 = \omega_*^2 \left( 3 \pm \sqrt{3 + 2(\cos p + \cos q + \cos(p - q))} \right), \quad \mathbf{k} = \frac{1}{b} (p\tilde{\mathbf{e}}_1 + q\tilde{\mathbf{e}}_2), \quad (26)$$

где  $b$  — расстояние между элементарными ячейками. Показано, что колебания полной кинетической энергии не зависят от начального соотношения между энергиями подрешеток и описываются формулами (21), (26). Также доказы-

вается, что при переходе кинетические энергии подрешеток стремятся к одинаковому значению.

Рассматриваются переходные процессы в линейной двумерной треугольной решетке с взаимодействием ближайших соседей. Показано, что колебания кинетической энергии описывается формулой (21), которая на больших временах имеет асимптотику:

$$\frac{2T}{T_0} \approx 1 + \frac{1}{2\sqrt{2}\pi\omega_*t} \left( 2\sqrt{\frac{6}{7}} \cos\left(\frac{9}{2}\omega_*t\right) + \sqrt{3} \sin\left(2\sqrt{6}\omega_*t\right) + \frac{3}{\sqrt{7}} \cos\left(2\sqrt{2}\omega_*t\right) \right). \quad (27)$$

Сравнение асимптотики с точным решением показывает, что формула (27) имеет приемлемую точность уже начиная с  $t \approx \tau_*$ .

На примере треугольной решетки с взаимодействиями Леннарда-Джонса исследуется влияние нелинейности на выравнивание кинетической и потенциальной энергий и перераспределение энергии по пространственным направлениям. Наличие нелинейности приводит к тому, что кинетическая и потенциальная энергии выравниваются быстрее, чем в линейном случае. Кроме того, кинетические энергии, соответствующие двум степеням свободы, уравниваются (см. рис. 8). На малых временах поведение кинетических энергий хорошо описывается линейной моделью.

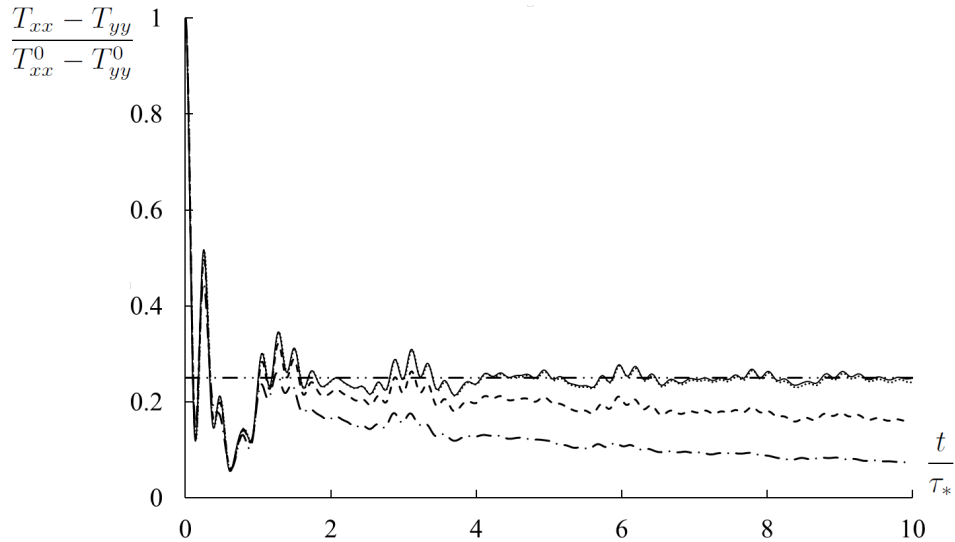


Рис. 8: Перераспределение энергии по пространственным направлениям при разных амплитудах начальных скоростей  $v_0$  ( $v_0/v_d = 0.05$  (точки);  $0.25$  (пунктир);  $0.5$  (штрих-пунктир); формула (22) (штрих-пунктир с двумя точками); решение для линейного кристалла (сплошная линия)). Здесь  $v_d$  — скорость диссоциации.

**В главе 3** рассматривается перенос энергии в упругих кристаллических

твердых телах. Как и в главе 2 в качестве модели упругого твердого тела используется идеальная кристаллическая решетка простой или сложной структуры. В начальный момент времени частицам сообщаются случайные скорости, соответствующие заданному пространственному распределению кинетической энергии. Такие начальные условия могут рассматриваться, например, в качестве модели воздействия на тело ультракороткого лазерного импульса. Развивается подход, позволяющий аналитически в континуальном приближении описывать перенос кинетической энергии по кристаллу за счет упругих волн. Проводится сравнение с результатами численного решения уравнений динамики.

В параграфе 3.1 приведен обзор литературы по аналитическим и численным методам описания переноса энергии в кристаллах на наноуровне.

В параграфе 3.2 исследуются перенос энергии в упругих твердых телах со скалярной кристаллической решеткой, описываемой уравнениями (6) с начальными условиями (7). Предполагается, что дисперсия начальных скоростей в формуле (7) медленно меняется на расстояниях порядка шага решетки.

Для описания переноса энергии используется уравнение динамики обобщенных кинетических энергий (9) со следующими начальными условиями, соответствующими начальному распределению кинетической энергии  $T_0 = \frac{M}{2} \langle v_0(\mathbf{x})^2 \rangle$ :

$$K = T_0(\mathbf{x})\delta_D(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad \dot{K} = 0, \quad \ddot{K} = (D_x + D_y) \left( T_0(\mathbf{x})\delta_D(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \right), \quad \ddot{\dot{K}} = 0. \quad (28)$$

Проводится континуализация уравнения (9). Для этого вводятся переменные  $\mathbf{x} - \mathbf{y}$  и  $\mathbf{r} = (\mathbf{x} + \mathbf{y})/2$ . Предполагается, что функция  $K(\mathbf{r}, \mathbf{x} - \mathbf{y})$  медленно меняется с изменением первого аргумента на расстояниях порядка шага решетки, тогда

$$D_x K \approx (D + \mathcal{R} \cdot \nabla) K, \quad \mathcal{R} = \frac{\omega_*^2}{2} \sum_{\alpha} b_{\alpha} \mathcal{S}_{\alpha} \mathbf{a}_{\alpha}, \quad D = \omega_*^2 \sum_{\alpha} b_{\alpha} \mathcal{S}_{\alpha}, \quad (29)$$

где  $\mathcal{S}_{\alpha} K = K(\mathbf{r}, \mathbf{x} - \mathbf{y} + \mathbf{a}_{\alpha})$ ,  $\nabla = \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}$  — набла-оператор. С учетом континуализации уравнение (9) принимает вид:

$$\ddot{\dot{K}} - 4D\ddot{K} + 4(\mathcal{R} \cdot \nabla)^2 K = 0. \quad (30)$$

Решение уравнения (30) с использованием принципа разделения движений и дискретного преобразования Фурье дает приближенную формулу для кинетической энергии:

$$T = T_F + T_S, \quad T_F = \frac{T_0(\mathbf{r})}{2} \int_{\mathbf{k}} \cos(2\omega t) d\mathbf{k}, \quad T_S = \frac{1}{2} \int_{\mathbf{k}} T_0(\mathbf{r} + \mathbf{v}_g t) d\mathbf{k}, \quad (31)$$

где  $\mathbf{v}_g(\mathbf{k})$  — групповая скорость. Здесь  $T_F$  описывает колебания, связанные с уравниванием кинетической и потенциальной энергий, рассмотренные в главе 2, а  $T_S$  — перенос кинетической энергии. Видно, что энергия переносится волнами, имеющими форму начального возмущения  $T_0$  и распространяющимися с групповыми скоростями, зависящими от волнового вектора.

С использованием формулы (31) строится фундаментальное решение задачи о переносе энергии. В одномерном случае оно имеет вид:

$$T_S = \frac{A}{4\pi t} \sum_j |v'_g(p_j)|^{-1}, \quad |v_g(p_j)| = |x|/t, \quad (32)$$

где  $A$  — константа; суммирование ведется по вещественным корням  $p_j$  второго уравнения. Формула (32) показывает, что кинетическая энергия стремится к бесконечности в экстремумах функции  $v_g(p)$ . Скорость распространения фронта энергии равна максимальной групповой скорости.

Фундаментальное решение получается также для двумерных скалярных решеток. Доказывается, что фундаментальное решение такое, что функция  $t^2 T_S$  — автомодельная, а форма фронта фундаментального решения — окружность. В качестве примера исследуется перенос энергии в растянутой квадратной решетке, совершающей поперечные колебания (см. **параграф 2.2**). Для нее фундаментальное решение задачи о переносе энергии имеет вид:

$$T_S = \frac{A}{2(\pi c_* t)^2} \sum_j \frac{q_j}{|q_j^2 - \tilde{r}^2(q_j + 1)|}, \quad (33)$$

$$q_j^3 - 2(\tilde{r}^2 + 1)q_j^2 + ((\tilde{r}^2 + 1)^2 - 4\tilde{x}^2\tilde{y}^2 + 1)q_j - 2\tilde{r}^2 = 0,$$

где  $\tilde{r}^2 = 1 - \tilde{x}^2 - \tilde{y}^2$ ,  $\tilde{x} = \frac{x}{c_* t}$ ,  $\tilde{y} = \frac{y}{c_* t}$ ,  $c_*$  — максимальный модуль групповой скорости. Суммирование ведется по всем вещественным корням  $q_j$  данного кубического уравнения, принадлежащим интервалу  $[0; 2]$ . Формула (33) показывает, в частности, что фронт энергии имеет форму круга радиуса  $c_* t$ .

С использованием формулы (31) решается задача о переносе энергии при  $T_0(x) = T_1(1 + H(x))$ , где  $H$  — функция Хевисайда;  $T_1$  — константа. Решение показано на рис. 9. Небольшие различия между аналитическим и численным решениями наблюдаются в окрестности точки  $x = 0$ , где энергия имеет максимальный градиент.

Также для квадратной решетки аналитически и численно решаются задачи с синусоидальным, круговым и прямоугольным распределениями начальной энергии.

**В параграфе 3.3** проводится обобщение полученных результатов на случай упругих тел со сложной кристаллической решеткой. Формулируется начальная

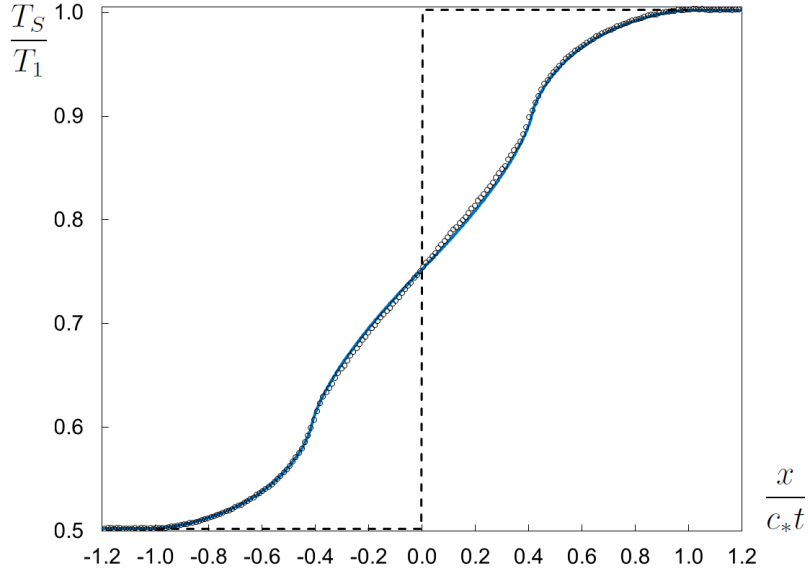


Рис. 9: Распределение энергии в квадратной решетке при  $t = 15\tau_*$ . Пунктир —  $T_0(x)/2$ , сплошная линия — формула (31), круги — численное решение.

задача (14), (15), к которой добавляется условие:

$$\langle \mathbf{v}_0(\mathbf{x}) \rangle = 0, \quad \langle \mathbf{v}_0(\mathbf{x}) \mathbf{v}_0(\mathbf{y}) \rangle = 2\mathbf{M}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{T}_0(\mathbf{x}) \mathbf{M}^{-\frac{1}{2}} \delta_D(\mathbf{x} - \mathbf{y}). \quad (34)$$

Функция  $\mathbf{T}_0(\mathbf{x})$  задает начальное поле кинетических энергий, соответствующих степеням свободы элементарной ячейки.

С использованием дискретного преобразования Фурье и свойств динамической матрицы, получается точное решение задачи (14), (15), (34), описывающее изменение кинетических энергий:

$$\mathbf{T}(\mathbf{x}, t) = \int_{\mathbf{k}_1} \int_{\mathbf{k}_2} \sum_{\mathbf{y}} \mathbf{P}_1 \mathbf{J}_1 \mathbf{P}_1^{*\top} \mathbf{T}_0(\mathbf{y}) \mathbf{P}_2 \mathbf{J}_2 \mathbf{P}_2^{*\top} e^{i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y})} d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2, \quad (35)$$

где  $\mathbf{J}_i = \mathbf{J}(\mathbf{k}_i)$ ,  $J_{ij} = \cos(\omega_i t) \delta_{ij}$ ,  $\mathbf{P}_i = \mathbf{P}(\mathbf{k}_i)$ . Матрица  $\mathbf{T}$  представляется в виде  $\mathbf{T} = \mathbf{T}_F + \mathbf{T}_S$ . Точные выражения для  $\mathbf{T}_F$ ,  $\mathbf{T}_S$  приведены в диссертации. Предполагается, что функция  $\mathbf{T}_0(\mathbf{x})$  медленно меняется на расстояниях порядка шага решетки. С использованием данного предположения в формуле (35)

проводится континуализация, в результате которой получается:

$$\begin{aligned} \mathbf{T} &= \mathbf{T}_F + \mathbf{T}_S, & \mathbf{T}_F &\approx \int_{\mathbf{k}} \mathbf{P} \tilde{\mathbf{T}}_F \mathbf{P}^{*\top} d\mathbf{k}, & \mathbf{T}_S &\approx \int_{\mathbf{k}} \mathbf{P} \tilde{\mathbf{T}}_S \mathbf{P}^{*\top} d\mathbf{k}, \\ \{\tilde{\mathbf{T}}_F\}_{ij} &= \frac{1}{2} \{ \mathbf{P}^{*\top} \mathbf{T}_0(\mathbf{x}) \mathbf{P} \}_{ij} [ \cos((\omega_i + \omega_j)t) + (1 - \delta_{ij}) \cos((\omega_i - \omega_j)t) ], & (36) \\ \{\tilde{\mathbf{T}}_S\}_{ij} &= \frac{1}{4} \{ \mathbf{P}^{*\top} (\mathbf{T}_0(\mathbf{x} + \mathbf{v}_g^j t) + \mathbf{T}_0(\mathbf{x} - \mathbf{v}_g^j t)) \mathbf{P} \}_{jj} \delta_{ij}, \end{aligned}$$

где  $\mathbf{v}_g^j$  — групповая скорость, соответствующая ветке дисперсионного соотношения  $\omega_j$ . Здесь  $\mathbf{T}_F$  описывает уравнивание кинетической и потенциальной энергий и перераспределение кинетической энергии по степеням свободы, а  $\mathbf{T}_S$  — перенос энергии. В случае  $\mathbf{T}_0 = \text{const}$  формула (36) совпадает с точным решением (20). В соответствии с формулой (36), энергия ячейки  $\mathbf{x}$  в момент  $t$  зависит только от энергий ячеек, находящихся от  $\mathbf{x}$  на расстоянии, не превосходящем  $\max_{\mathbf{k}, j} (|\mathbf{v}_g^j|) t$ .

Формула (36) используется для исследования переноса энергии. В частности, выводится фундаментальное решение задачи о переносе энергии. Доказывается, что фундаментальное решение, умноженное на  $t^d$  — автомодельное и зависит от  $\mathbf{x}/t$ . Доказывается, что фронт, соответствующий фундаментальному решению, имеет форму сферы, радиус которой линейно растет во времени с максимальной групповой скоростью (см. рис. 11). Также рассматривается синусоидальное распределение начальной энергии

$$\mathbf{T}_0(\mathbf{x}) = \left( T_b + \Delta T \sin \frac{2\pi \mathbf{x} \cdot \mathbf{e}}{L} \right) \mathbf{E}, \quad (37)$$

где  $T_b, \Delta T$  — константы;  $L$  — длина ячейки периодичности в направлении возмущения. В таком случае решение задачи о переносе энергии имеет вид:

$$\begin{aligned} T &= \frac{1}{d} \text{tr} \mathbf{T} = T_F + T_S, & T_F &= \frac{1}{2N} \left( T_b + \Delta T \sin \frac{2\pi x}{L} \right) \sum_{j=1}^N \int_{\mathbf{k}} \cos(2\omega_j t) d\mathbf{k}, \\ T_S &= \frac{T_b}{N} + \frac{\Delta T}{2N} \sin \frac{2\pi x}{L} \sum_{j=1}^N \int_{\mathbf{k}} \cos \frac{2\pi v_g^j t}{L} d\mathbf{k}. \end{aligned} \quad (38)$$

Здесь  $v_g^j = \mathbf{v}_g^j \cdot \mathbf{e}$ . Из формулы (38) видно, что величины  $T_F$  и  $T_S$  имеют разные характерные времена. Характерное время  $T_F$  соизмеримо с периодом колебаний атомов, а характерное время  $T_S$  определяется временем прохождения волной расстояния  $L$ .



Рассматривается перенос энергии в двухатомной цепочке с чередующимися массами, описываемой уравнениями динамики (14), (23). С использованием формулы (36) решается задача со ступенчатым распределением начальной энергии:

$$\mathbf{T}_0(x) = T_b (1 + H(x)) \mathbf{E}. \quad (39)$$

Решение показывает, что при  $t > 0$  энергии подрешеток  $T_{11}, T_{22}$  существенно отличаются, несмотря на то, что в начальный момент времени они равны в каждой точке (см. рис. (10)).

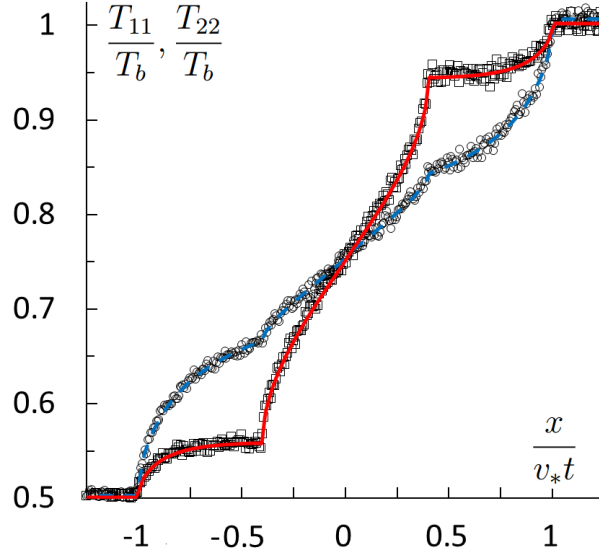


Рис. 10: Перенос энергии в двухатомной цепочке с начальным распределением энергии (39) при  $m_2 = 2m_1, c_1 = c_2$ . Показаны энергии подрешеток  $T_{11}$  (сплошная линия и квадраты) и  $T_{22}$  (пунктирная линия и круги) в момент времени  $t = 500\tau_{min}$ . Здесь  $\tau_{min} = 2\pi/\omega_{max}$ ,  $\omega_{max}$  — максимальная частота. Линии — аналитическое решение, точки — численное решение уравнений динамики.

Решается задача о затухании синусоидального профиля начальной кинетической энергии (37). Формула (38) показывает, что как и в предыдущем примере, энергии подрешеток при  $t > 0$  отличаются ( $T_{11} \neq T_{22}$ ), несмотря на то, что в начальный момент времени они равны. Отметим также, что затухание происходит немонотонно.

Рассматривается перенос энергии в решетке графена, описываемой уравнениями динамики (14) и (25). Решается задача о переносе энергии в случае, когда начальная энергия равна  $T_1$  в круге радиуса  $10a$  и равна нулю в остальных точках. Сходимость численного решения при осреднении по реализациям с различными начальными условиями показана на рис. 11. Видно, что фронт энергии имеет форму окружности. В тоже время перенос энергии существенно анизотро-

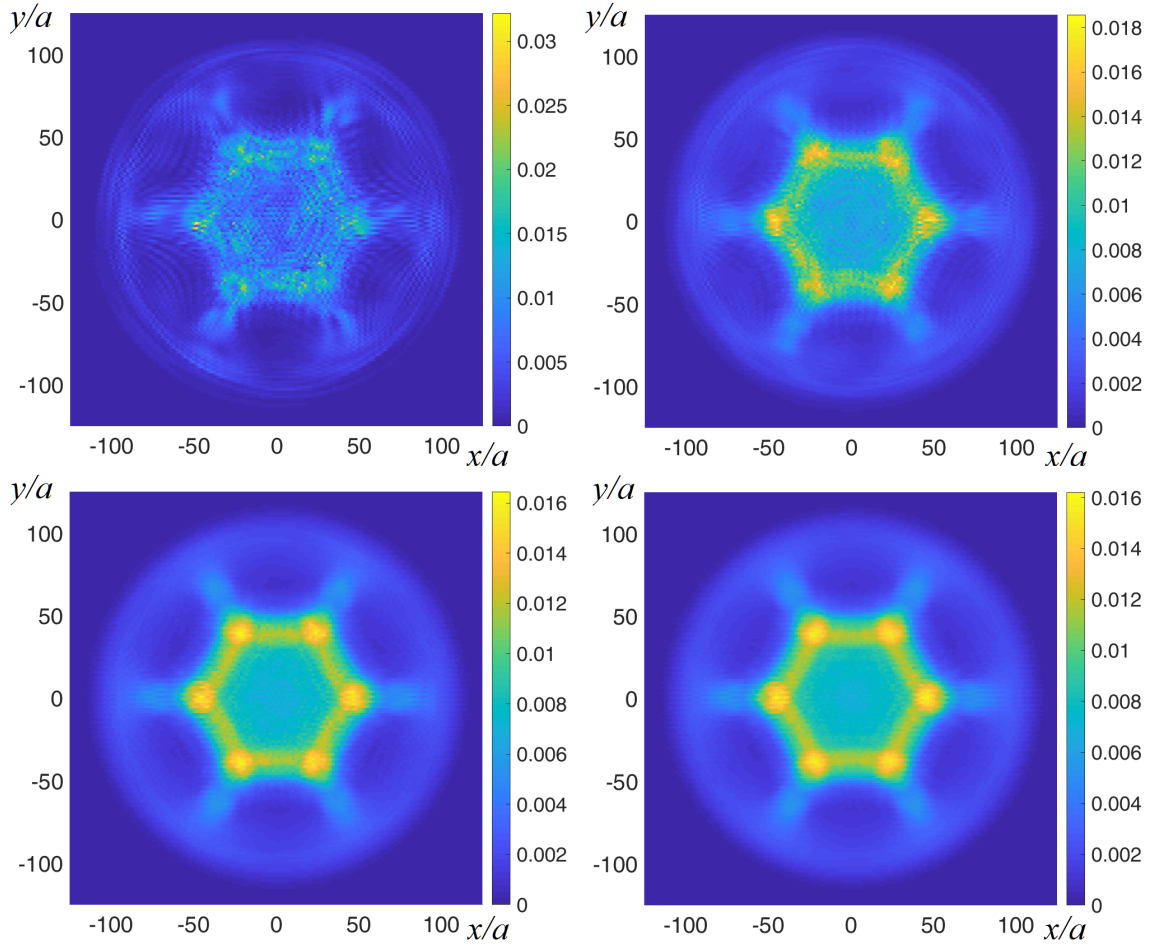


Рис. 11: Поле энергии в графене в момент времени  $t = 20\tau_*$ . Показаны результаты осреднения численного решения по  $10, 10^2, 10^3, 10^4$  реализаций. Цветовая шкала показывает  $T/T_1$ .

пен.

Решаются задачи о затухании синусоидального распределения начальной энергии (37) в направлениях зигзаг ( $x$ ) и кресло ( $y$ ). Аналитически и численно определяется амплитуда  $A$  профиля энергии (рис. 12). Рисунок 12 показывает, что изменения энергии в двух задачах близки при  $t \leq L/v_*$  и существенно отличаются при  $t > L/v_*$ . Затухание происходит немонотонно.

**В параграфе 3.4** решаются задачи о подводе энергии в цепочку на упругом основании при гармоническом силовом и кинематическом воздействиях. Исследуется зависимость скорости подвода энергии от частоты внешнего воздействия.

Рассматривается линейная цепочка, состоящая из  $N$  одинаковых частиц, соединенных пружинками жесткости  $K > 0$  и находящуюся на упругом основании

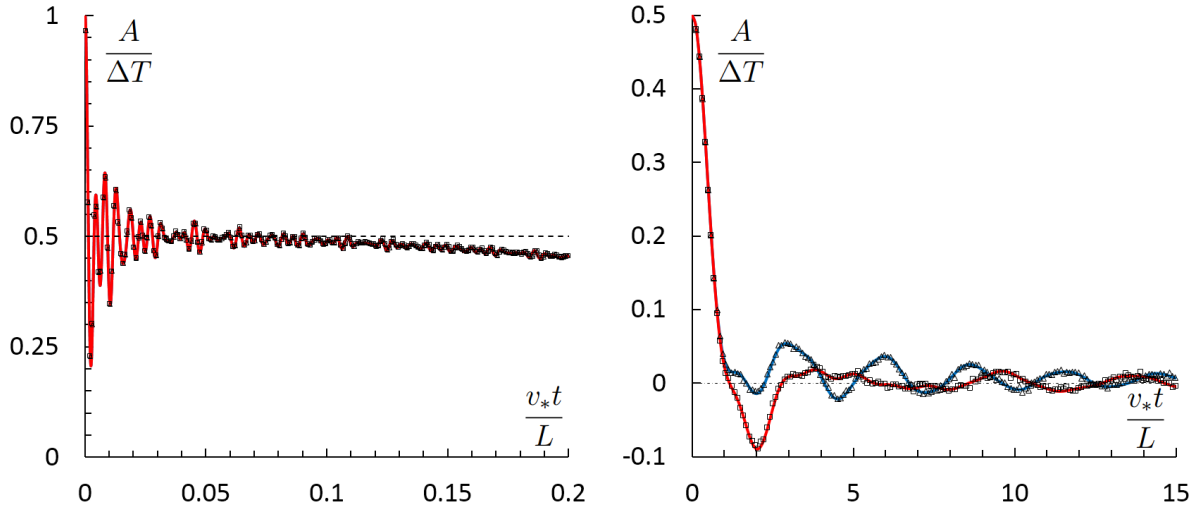


Рис. 12: Амплитуда  $A$  синусоидального распределения энергии в графене. Аналитические решения задач с распределениями энергии в направлениях зигзаг (красная линия) и кресло (голубая линия). Квадраты и треугольники — результаты численного решения уравнений динамики. Здесь  $v_* = \omega_* a$ .

с жесткостью  $k > 0$ . При силовом нагружении уравнения динамики имеют вид

$$m\ddot{u}_n = K(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) - ku_n + A_f \sin(\omega t)\delta_n, \quad (40)$$

где  $m$  — масса частицы;  $\delta_0 = 1$  и  $\delta_n = 0$  для  $n \neq 0$ ;  $A_f, \omega$  — амплитуда и частота воздействия. В случае кинематического нагружения частицы  $n = 0$  и  $n = N$  перемещается по закону  $u_0 = A_d \sin(\omega t)$ , а движение остальных частиц описывается уравнением (40) при  $A_f = 0$ . Используются нулевые начальные условия и периодические граничные условия  $u_n = u_{n+N}$ .

Вычисляется дисперсионное соотношение и групповая скорость:

$$\begin{aligned} \Omega^2(p) &= \omega_{\min}^2 + (\omega_{\max}^2 - \omega_{\min}^2) \sin^2 \frac{p}{2}, & \omega_{\min}^2 &= \frac{k}{m}, & \omega_{\max}^2 &= \frac{4K+k}{m}, \\ v_g &= \frac{a}{2\Omega} \sqrt{(\Omega^2 - \omega_{\min}^2)(\omega_{\max}^2 - \Omega^2)}. \end{aligned} \quad (41)$$

Групповая скорость обращается в ноль при  $\Omega = \omega_{\min} \neq 0$  и  $\Omega = \omega_{\max}$ .

Исследуется подвод энергии при силовом нагружении. Уравнения динамики (40) решаются с использованием дискретного преобразования Фурье. Полная энергия  $U$  системы вычисляется на основе уравнения баланса энергии. Выво-

дятся асимптотические формулы для энергии на больших временах:

$$U \approx \frac{A_f^2 a t}{4m v_g(\omega)}, \quad \omega \in (\omega_{\min}; \omega_{\max}),$$

$$U \approx \frac{A_f^2 \sqrt{\omega}}{3m \sqrt{\pi(\omega_{\max}^2 - \omega_{\min}^2)}} t^{\frac{3}{2}}, \quad \omega = \omega_{\min} \neq 0 \vee \omega = \omega_{\max}. \quad (42)$$

При  $\omega \in (\omega_{\min}; \omega_{\max})$  скорость роста энергии обратно пропорциональна групповой скорости. Формулы (42) хорошо согласуются с результатами численного интегрирования уравнений динамики (см. рис. 13).

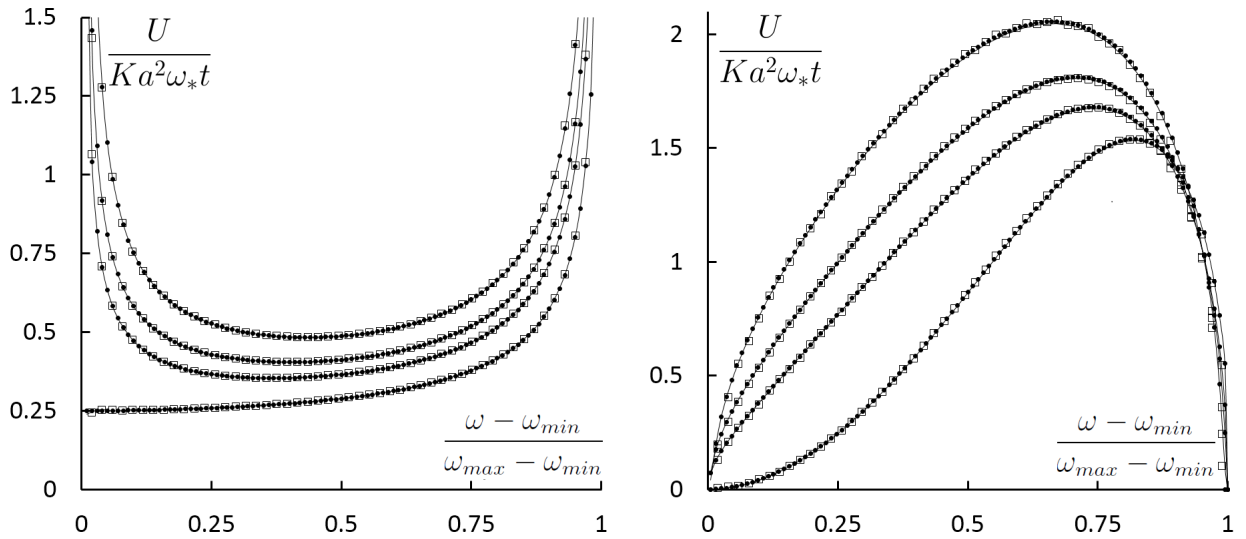


Рис. 13: Зависимость скорости роста энергии  $U/t$  от частоты внешнего воздействия  $\omega$  при силовом нагружении (слева) и кинематическом нагружении (справа) для  $k/K = 0, 0.5, 1, 2$ . Нижняя кривая соответствует  $k = 0$ . Точное решение (сплошная линия), приближенные формулы (круги) и численное решение уравнений движения (квадраты).

Исследуется подвод энергии при кинематическом нагружении. С использованием разложения по собственным формам получается точное решение уравнений динамики. На основе точного решения вычисляется полная энергия системы. Выводится асимптотическая формула для энергии на больших временах:

$$U \approx A_d^2 m \omega^2 v_g(\omega) t / a. \quad (43)$$

В отличие от случая силового нагружения, при кинематическом скорость роста энергии пропорциональна групповой скорости, соответствующей частоте внеш-

него воздействия. Формула (43) с высокой точностью описывает результаты численного решения уравнений динамики (см. рис. 13).

Проводится сравнение полученных результатов с решениями двух задач о подводе энергии в линейно-упругий, полубесконечный стержень постоянного сечения. Продольные движения стержня описываются уравнением

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = v_s^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad v_s^2 = \frac{E}{\rho}, \quad (44)$$

При кинематическом нагружении граничное условие при  $x = 0$  имеет вид  $u = A_d \sin(\omega t)H(t)$ , а при силовом —  $\varepsilon(0, t) = \frac{A_f}{2ES} \sin(\omega t)H(t)$ . Строится решение уравнения (44) с нулевыми начальными условиями. Вычисляется полная энергия стержня, которая на больших временах имеет вид:

$$U_d \approx \frac{1}{2} \rho S A_d^2 \omega^2 v_s t, \quad U_f \approx \frac{A_f^2 t}{4 \rho S v_s}. \quad (45)$$

где  $S$  — площадь сечения стержня.

Формулы (45) для стержня совпадают с асимптотическими формулами (42), (43) для цепочки, если сделать замену  $v_s \rightarrow v_g(\omega)$  и  $\rho S \rightarrow m/a$ . Отметим, что рассмотренная континуальная модель неприменима при кинематическом нагружении в случае  $v_s = v_g = 0$ . Следовательно при  $\omega = \omega_{\min} \neq 0$  и  $\omega = \omega_{\max}$  необходимо использовать формулы (42).

**В главе 4** рассматривается термоупругость кристаллов простой структуры с парными взаимодействиями. Исходя из уравнений динамики кристалла, выводятся континуальные уравнения связанной термоупругости. В адиабатическом приближении получаются линейные и нелинейные определяющие соотношения, связывающие напряжения, деформации и тепловую энергию. В частности, рассматривается линейная термоупругость цепочки Ферми-Паста-Улама, перенос энергии в которой описывается с использованием результатов **главы 3**. Аналитически демонстрируются новые механические эффекты, возникающие за счет баллистического характера переноса тепловой энергии. Численно исследуется процесс затухания механических колебаний при конечной температуре. Также выводятся нелинейные определяющие соотношения термоупругости цепочки, совершающей продольные и поперечные колебания.

**В параграфе 4.1** приведен обзор литературы по континуальному и дискретному моделированию термоупругих процессов в кристаллах. Особое внимание уделяется проблеме вывода континуальных уравнений термоупругости из уравнений динамики частиц кристалла.

**Параграф 4.2** посвящен описанию термоупругости нелинейной одномерной цепочки с учетом баллистического переноса энергии. Уравнение динамики

цепочки имеет вид:

$$m\dot{v}_n = F_n - F_{n-1}, \quad F_n = \Pi'(a + \epsilon_n), \quad \epsilon_n = u_{n+1} - u_n, \quad (46)$$

где  $\Pi$  — потенциал взаимодействия,  $a$  — равновесное расстояние.

С использованием осреднения по реализациям проводится разделение движений на механические и тепловые. Перемещение частицы представляется в виде  $u_n = \langle u_n \rangle + \tilde{u}_n$ . Механическим движением называется изменение во времени математического ожидания перемещения частицы  $\langle u_n \rangle$ , а тепловым движением — величина  $\tilde{u}_n$ .

Для описания механических движений вычисляется математическое ожидание обеих частей уравнения (46). В получившемся уравнении проводится континуализация. Предполагается, что математические ожидания всех величин медленно меняются на расстояниях порядка расстояния между частицами  $a$ . В результате получается уравнение, описывающее динамику цепочки в континуальном приближении:

$$\rho\dot{v} = \frac{\partial\sigma}{\partial x}, \quad \sigma(r_n) = \langle F_n \rangle, \quad \rho(r_n) = \frac{m}{V(r_n)}, \quad V(r_n) = a + \langle \epsilon_n \rangle. \quad (47)$$

Для перехода к континуальному описанию переноса тепловой энергии в цепочке рассматривается уравнение баланса энергии для частицы  $n$ . Вычисляется производная от математического ожидания энергии, приходящейся на частицу. В получившемся выражении проводится континуализация, в результате чего получается уравнение:

$$\rho\dot{\mathcal{U}} = \sigma \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial h}{\partial x}, \quad h = -\langle F_n \tilde{v}_n \rangle, \quad U = m\mathcal{U} = \frac{m}{2} \langle \tilde{v}_n^2 \rangle + \langle \Pi(a + \epsilon_n) \rangle. \quad (48)$$

Здесь  $\mathcal{U}$  — плотность внутренней энергии,  $h$  — тепловой поток. Формулы (47) и (48) устанавливают связь напряжений и теплового потока с параметрами цепочки.

Далее выводятся определяющие соотношения в форме Ми-Грюнайзена и Дюамеля-Неймана. Для напряжений и внутренней энергии проводится разделение на холодную и тепловую составляющие:

$$\begin{aligned} \sigma &= \langle \Pi'(V + \tilde{\epsilon}_n) \rangle = \sigma_0 + \sigma_T, & \sigma_0 &= \Pi'(V), & \sigma_T &= \sigma - \sigma_0, \\ U &= U_0 + U_T, & U_T &= U - U_0, & U_0 &= \Pi(V). \end{aligned} \quad (49)$$

Выражения для тепловых напряжений  $\sigma_T$  и тепловой энергии  $U_T$  раскладыва-

ются в ряд по параметру  $\tilde{\epsilon}_n$ , характеризующему тепловое движение. Предполагается, что кинетическая энергия теплового движения равна потенциальной (показано в главе 2). Исключая параметр  $\langle \tilde{\epsilon}_n^2 \rangle$  из уравнений для тепловой энергии и напряжений, получается определяющее уравнение в форме Ми-Грюнайзена. В случае малых деформаций и температур оно принимает вид соотношения Дюамеля-Неймана:

$$\sigma = E(\varepsilon - \beta T), \quad \beta = \frac{\Gamma c_V \rho}{E}, \quad k_B T = m \langle \tilde{v}_n^2 \rangle, \quad E = \Pi''(a) a, \quad (50)$$

где  $T$  — температура,  $E$  — модуль Юнга,  $\Gamma$  — коэффициент Грюнайзена,  $\beta$  — коэффициент теплового расширения,  $c_V = k_B/m$ . Подстановка определяющих соотношений (50) в уравнения баланса дает:

$$\ddot{u} = c_s^2 \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \beta \frac{\partial T}{\partial x} \right), \quad \rho c_V \dot{T} = -\beta E T \dot{\varepsilon} - \frac{\partial h}{\partial x}, \quad (51)$$

где  $c_s$  — скорость звука. Таким образом, для цепочки получается система уравнений связанной термоупругости.

В качестве примера исследуется континуальная термоупругость цепочки Ферми-Паста-Улама ( $\alpha$ -ФПУ):

$$m \dot{v}_n = C(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) + \alpha \left( (u_{n+1} - u_n)^2 - (u_n - u_{n-1})^2 \right), \quad (52)$$

где  $C$  — жесткость пружинки при малых деформациях,  $\alpha$  — коэффициент нелинейности. Используются периодические граничные условия  $u_n = u_{n+N}$ . Рассматриваются начальные условия, соответствующие синусоидальному распределению начальной кинетической температуры  $T_0 = T_b + \Delta T \sin(\lambda x)$ ,  $\lambda = 2\pi/L$ , где  $L$  — длина цепочки. В начальный момент времени механические движения и потоки отсутствуют.

Решается задача термоупругости, соответствующая описанной выше начальной задаче для цепочки. Макроскопическая динамика цепочки описывается первым из уравнений (51). Для вычисления поля температуры используется формула (38), полученная в главе 3. Решение уравнения динамики (51) с нулевыми начальными условиями и периодическими граничными условиями и формула (38) дают точные выражения для перемещений и температуры:

$$u = z(t) \cos(\lambda x), \quad \frac{\lambda z}{\beta \Delta T} = -\omega t J_1(\omega t) \approx -\sqrt{2\omega t/\pi} \cos(\omega t - 3\pi/4), \quad (53)$$

$$T = T_b + \Delta T J_0(\omega t) \sin(\lambda x).$$

Видно, что температура цепочки совершает затухающие колебания, описываемые функцией Бесселя  $J_0$ . Частота данных колебаний совпадает с первой собственной частотой системы. Колебания температуры играют роль периодической внешней силы, приводящей к росту амплитуды механических колебаний  $z \sim \sqrt{t}$ . Данное явление называется в работе баллистическим резонансом. Механическая энергия системы  $\mathcal{E}$  растет практически линейно:

$$\frac{\mathcal{E}}{\mathcal{E}_*} = \frac{1}{2\mathcal{E}_*L} \int_0^L (\rho v^2 + E u'^2) dx = \omega^2 t^2 [J_0^2(\omega t) + J_1^2(\omega t)] \approx \frac{2}{\pi} \omega t, \quad \mathcal{E}_* = \frac{E\beta^2 \Delta T^2}{4}. \quad (54)$$

Отметим, что в отличие от обычного механического резонанса, баллистический резонанс реализуется при отсутствии внешних воздействий (за счет частичного перехода тепловой энергии в механическую).

В работе также проводится обобщение на случай произвольного периодического распределения начальной температуры  $T_0(x) = T_0(x + L)$ . Показано, что при таких начальных условиях резонируют все собственные формы, входящие в разложение функции  $T_0(x)$  в ряд Фурье. При этом основной вклад в рост амплитуды вносят формы с большей длиной волны.

Для проверки аналитических результатов проводится численное решение уравнений динамики цепочки. Поведение амплитуды механических колебаний  $z$  и механической энергии  $\mathcal{E}$  показано на рис. 14. На малых временах результаты моделирования хорошо описываются аналитическим решением (53), (54); на больших — аналитическое решение отклоняется от численного за счет перехода механической энергии в тепловую, не учитываемого в аналитике.

Переход механической энергии в тепловую приводит к затуханию колебаний, возникших за счет баллистического резонанса. Данный процесс не описывается континуальной моделью (38), (51), поэтому исследуется численно (см. рис. 14). В частности, определяется зависимость максимальной возбуждаемой механической энергии от коэффициента  $\alpha$ , характеризующего нелинейность. Для всех рассмотренных значений  $\alpha$  максимальная механическая энергия на несколько порядков меньше, чем тепловая энергия. Полученные результаты показывают, что добавление конечного теплового движения устраняет парадокс возвращения, присутствующий в классической задаче ФПУ.

**В параграфе 4.3** проводится континуализация уравнений динамики двумерных и трехмерных кристаллов с парными взаимодействиями. Получаются выражения для тензоров напряжений Коши и Пиоала. С использованием данных выражений выводится определяющее соотношение Ми-Грюнаизена и выражение для коэффициента теплового расширения. Проводится уточнение данного выражения для треугольной решетки с использованием результатов главы 2. Определяются условия, которым должен удовлетворять потенциал взаимодей-



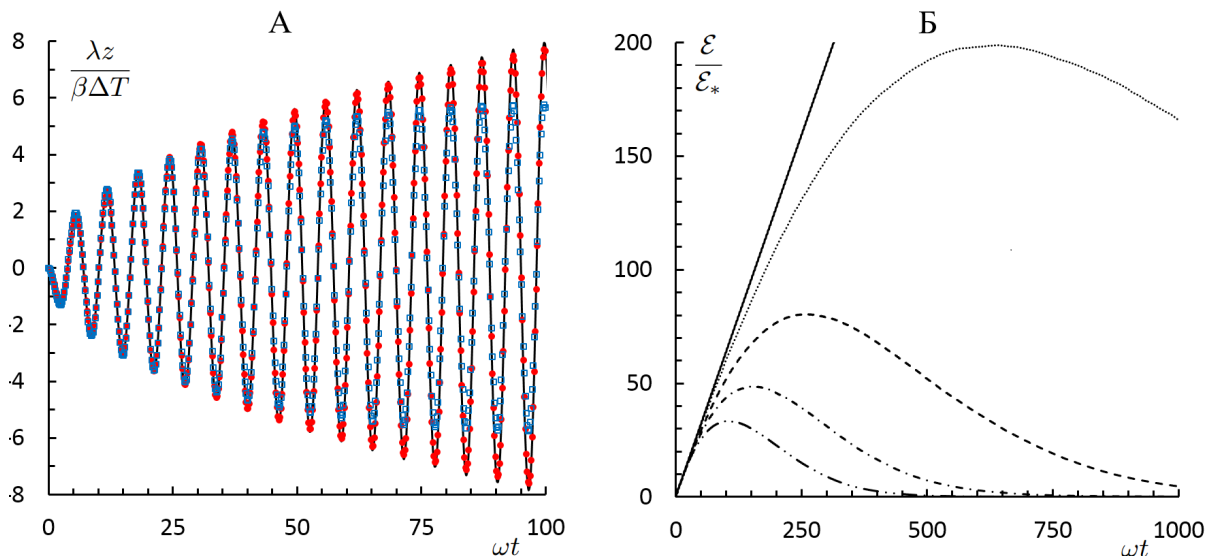


Рис. 14: А. Рост амплитуды механических колебаний при баллистическом резонансе. Сплошная линия — формула (53), круги и квадраты — результаты моделирования при  $\alpha a/C = -0.25$  и  $-1$ . Б. Макроскопическая механическая энергия системы  $\mathcal{E}$ . Сплошная линия — формула (54) и результаты моделирования при  $\alpha a/C = -0.25$  (точки),  $-0.5$  (пунктир),  $-0.75$  (штрих-пунктир) и  $-1$  (штрих-пунктир с двумя точками).

ствия для реализации отрицательного теплового расширения.

**В параграфе 4.4** выводятся нелинейные определяющие соотношения, описывающие термоупругое поведение цепочки, совершающей продольные и поперечные колебания. Рассматривается однородно нагретая цепочка. Средние характеристики всех частиц одинаковы. Вектор, соединяющий частицу с одним из соседей, представляется в виде  $\mathbf{A} = \langle \mathbf{A} \rangle + \tilde{\mathbf{A}}$ , где  $\langle \mathbf{A} \rangle = A_0 \mathbf{e}$ ,  $A_0$  — расстояние между частицами при отсутствии теплового движения,  $\mathbf{e}$  — вектор, направленный вдоль цепочки,  $\tilde{\mathbf{A}}$  — тепловая составляющая вектора  $\mathbf{A}$ .

Макроскопическое напряжение  $\sigma$  и внутренняя энергия представляется в виде суммы холодной  $\sigma_0$ ,  $U_0$  и тепловой  $\sigma_T$ ,  $U_T$  компонент, определяемых формулами

$$\begin{aligned} \sigma &= \langle \mathbf{F} \rangle \cdot \mathbf{e}, \quad \sigma_0 = 2\Pi'(A_0^2)A_0, \quad \sigma_T = \sigma - \sigma_0, \\ U_0 &= \Pi(A_0^2), \quad U_T = \frac{m}{2} \langle \tilde{\mathbf{v}}^2 \rangle + \langle \Pi(\mathbf{A}^2) \rangle - \Pi(A_0^2), \end{aligned} \tag{55}$$

где  $\Pi$  — потенциал взаимодействия. Видно, что тепловое напряжение и тепловая энергия зависят от вектора  $\tilde{\mathbf{A}}$ , характеризующего тепловые деформации связей.

Выводится определяющее соотношение, описывающее линейную термоупругость квазиодномерной цепочки. Предполагается, что тепловые деформации

связей малы. Напряжение и тепловая энергия раскладываются в ряд по  $\tilde{\mathbf{A}}$ . Исключение  $\tilde{\mathbf{A}}$  дает определяющее соотношение в форме Ми-Грюнайзена:

$$\sigma = \sigma_0 - \frac{\Gamma(A_0)}{A_0} U_T, \quad \Gamma = \frac{\Gamma_l + \Gamma_{tr}}{2}, \quad \Gamma_l = -\frac{\hat{\Pi}''' A_0}{2\hat{\Pi}''}, \quad \Gamma_{tr} = -\frac{\hat{\Pi}'' A_0 - \hat{\Pi}'}{2\hat{\Pi}'}. \quad (56)$$

Здесь и далее  $\hat{\Pi}(A_0) = \Pi(A_0^2)$ . Параметр Грюнайзена  $\Gamma$  имеет две составляющие  $\Gamma_l$ ,  $\Gamma_{tr}$ , соответствующие вкладам продольных и поперечных колебаний соответственно. Вклад продольных колебаний  $\Gamma_l$  связан с нелинейностью межчастичных взаимодействий и обращается в ноль при  $\hat{\Pi}''' = 0$ . Вклад поперечных колебаний  $\Gamma_{tr}$  обусловлен только геометрической нелинейностью. Зависимость параметра Грюнайзена от деформации для потенциала Леннарда-Джонса показана на рис. 15. Видно, что параметр Грюнайзена имеет особенность для

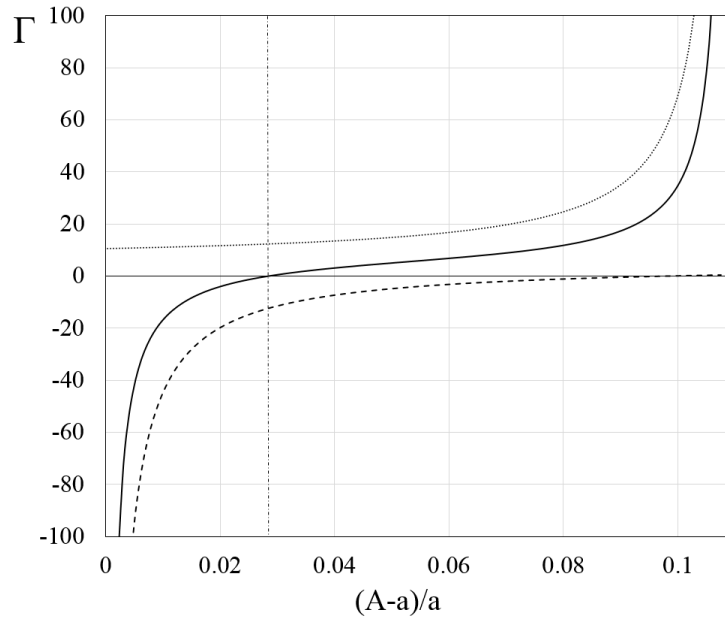


Рис. 15: Зависимость коэффициента Грюнайзена от деформации цепочки ( $\Gamma$  — сплошная линия,  $\Gamma_l$  — точки,  $\Gamma_{tr}$  — пунктир).

нерастянутой цепочки  $A_0 = a$  и вблизи критической деформации  $A_0 \approx 1.109a$ . Нулевое тепловое расширение реализуется при  $A_0 = A_*$ :

$$\Gamma(A_*) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \hat{\Pi}''' \hat{\Pi}' A_* + \hat{\Pi}'' (\hat{\Pi}'' A_* - \hat{\Pi}') = 0, \quad (57)$$

где производные вычислены при  $A_0 = A_*$ .

Выводится определяющее соотношение, описывающее нелинейное термоупругое поведение цепочки. В разложении теплового напряжения и тепловой энергии сохраняются слагаемые до четвертого порядка включительно. Делается предпо-

ложение о малости слагаемых, характеризующих продольные деформации цепочки. После исключения из выражений для теплового напряжения и тепловой энергии тепловых деформаций связей, получается:

$$\sigma_T = -\frac{B_2}{B_4}U_T - \frac{(B_2B_3 - B_1B_4)(B_3 - \sqrt{B_3^2 + 4B_4U_T})}{2B_4^2}, \quad B_1 = -\frac{2}{A}(\Pi'' A_0^2 - \Gamma_l \Pi'),$$

$$B_2 = -\frac{2}{A_0}(\mu - \Gamma_l(\lambda + \mu))\Pi'' - (\lambda + 4\mu)\Pi''' A_0, \quad B_3 = 4\Pi', \quad B_4 = \frac{7}{2}(\lambda + 2\mu)\Pi''. \quad (58)$$

Здесь  $\mu, \lambda$  — параметры, зависящие от потенциала взаимодействия. При малых значениях тепловой энергии

$$\sigma_T \approx \begin{cases} -\frac{\Gamma(A_0)}{A_0}U_T - \frac{B_2A_0 - \Gamma(A_0)B_4}{16\Pi'^2 A_0}U_T^2, & A_0 > a, \\ 2\left(\frac{2\Pi''(a)a^2}{7(\lambda + 2\mu)}\right)^{\frac{1}{2}}\sqrt{U_T}, & A_0 = a. \end{cases} \quad (59)$$

Формула (59) показывают, что при  $A_0 = a$  и  $A_0 = A_*$  ( $\Gamma(A_*) = 0$ ) линейное приближение функции  $\sigma_T(U_T)$ , задаваемое уравнением Ми-Грюнайзена, может давать существенную ошибку. В частности, для нерастянутой цепочки ( $A_0 = a$ ) зависимость  $\sigma_T(U_T)$  имеет корневую асимптотику при малых  $U_T$ .

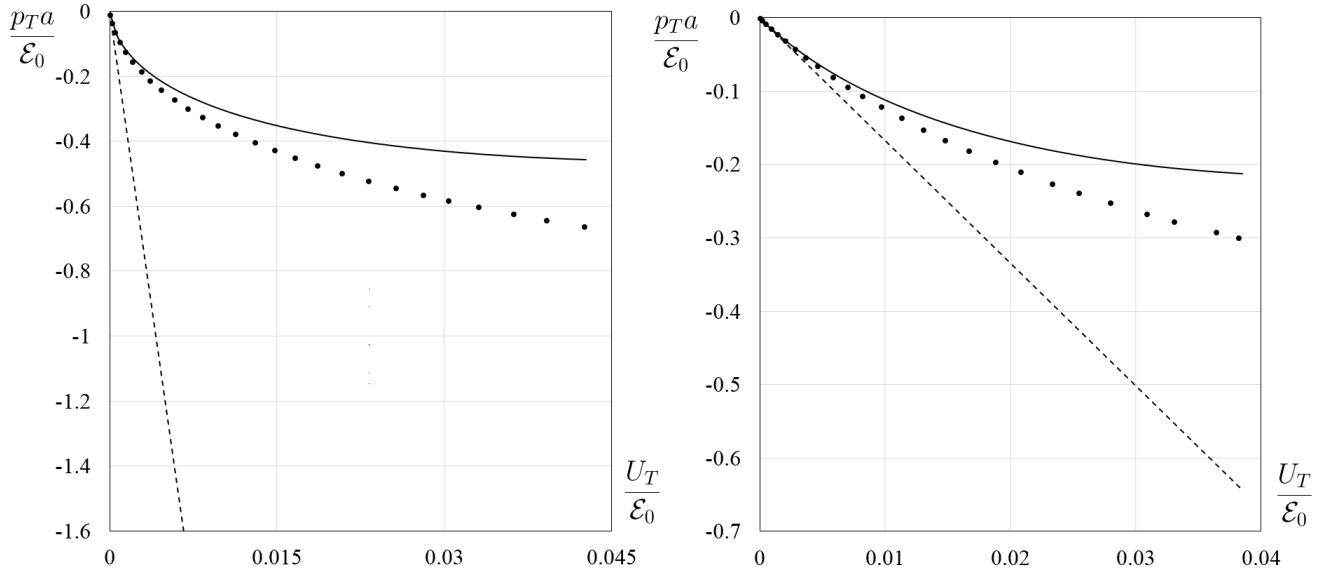


Рис. 16: Зависимости теплового давления ( $p_T = -\sigma_T$ ) от тепловой энергии для цепочки, растянутой на 0.1% (слева) и 1% (справа). Здесь  $\epsilon_0$  — энергия связи.

Зависимости теплового давления от тепловой энергии для цепочки Леннарда-Джонса, растянутой на 0.1% и 1% показаны на рис. 16. Максимальное значе-

ние тепловой энергии, приведенное на графике, соответствует разрыву цепочки. Уравнение Ми-Грюнаизена (56) дает правильный наклон зависимости  $\sigma_T(U_T)$  при малых  $U_T$ . Однако при конечных тепловых энергиях оно имеет заметную погрешность, т.к. квадратичные слагаемые в формуле (59) становятся существенными. В тоже время нелинейное определяющее соотношение (58) имеет существенно более высокую точность при всех значениях деформации.

**В заключении** сформулированы основные результаты работы, выносимые на защиту.

## Публикации в изданиях, рекомендованных ВАК или индексируемых в Web of Science/Scopus

### Публикации по теме диссертации:

1. Kuzkin, V.A. Comment on negative thermal expansion in single-component systems with isotropic interactions // Journal of Physical Chemistry.— 2014.— Vol. 118, No. 41.— pp. 9793–9794.
2. Kuzkin, V.A., Krivtsov, A.M., Jones, R.E., Zimmerman, J.A. Material stress representation of equivalent stress tensor for discrete solids // Physical Meso-mechanics.— 2015.— Vol. 18, No. 1.— p. 13.
3. Kuzkin, V.A., Krivtsov, A.M. Nonlinear positive/negative thermal expansion and equations of state of a chain with longitudinal and transverse vibrations // Physica Statatus Solidi b.— 2015.— Vol. 252.— p. 1664.
4. Kuzkin, V.A., Kachanov, M. Contact of rough surfaces: Conductance-stiffness connection for contacting transversely isotropic half-spaces // International Journal of Engineering Science.— 2015.— Vol. 97.— pp. 1-5.
5. Kuzkin, V.A. On angular momentum balance in particle systems with periodic boundary conditions // Journal of Applied Mathematics and Mechanics.— 2015.— Vol. 95, Is. 11.— pp. 1290–1295.
6. Kuzkin, V.A., Krivtsov, A.M., Podolskaya, E.A., Kachanov, M.L. Lattice with vacancies: elastic fields and effective properties in frameworks of discrete and continuum models // Philosophical Magazine.— 2016.— Vol. 96, No. 15.— pp. 1538-1555.
7. Кузькин, В.А., Кривцов, А.М. Высокочастотные тепловые процессы в гармонических кристаллах // Доклады академии наук.— 2017.— Т. 472, No. 5.— с. 529–533.

8. Кузькин, В.А., Кривцов, А.М. Аналитическое описание переходных тепловых процессов в гармонических кристаллах // Физика твердого тела.— 2017.— Т. 59, Вып. 5.— с. 1023-1035.
9. Kuzkin, V.A., Krivtsov, A.M. Fast and slow thermal processes in harmonic scalar lattices // Journal of Physics: Condensed Matter.— 2017.— Vol. 29.— p. 505401.
10. Tsaplin, V.A., Kuzkin, V.A., An asymptotic formula for displacement field in triangular lattice with vacancy // Letters on materials.— 2017.— Vol. 7, No. 4.— pp. 341-344.
11. Saadatmand, D., Xiong, D., Kuzkin, V.A., Krivtsov, A.M., Savin, A.V., Dmitriev, S.V., Discrete breathers assist energy transfer to ac driven nonlinear chains // Physical Review E.— 2019.— Vol. 97.— p. 022217.
12. Tsaplin, V.A., Kuzkin, V.A., Temperature oscillations in harmonic triangular lattice with random initial velocities // Letters on materials.— 2018.— Vol. 8, No. 1.— pp. 16–20.
13. Krivtsov, A.M., Kuzkin, V.A. Discrete and continuum thermomechanics. In: Altenbach H., Öchsner A. (eds) Encyclopedia of Continuum Mechanics. Springer, Berlin, Heidelberg (2018).
14. Kuzkin, V.A. Thermal equilibration in infinite harmonic crystals // Continuum Mechanics and Thermodynamics.— 2019.— Vol. 31, No. 5.— pp. 1401–1423.
15. Kuzkin, V.A. Unsteady ballistic heat transport in harmonic crystals with polyatomic unit cell // Continuum Mechanics and Thermodynamics.— 2019.— Vol. 31, No. 6.— pp. 1573-1599.
16. Berinskii, I.E., Kuzkin, V.A. Equilibration of energies in a two-dimensional harmonic graphene lattice // Philosophical Transactions of the Royal Society A.— 2019.— Vol. 378, Is. 2162.
17. Kuzkin, V.A., Krivtsov, A.M. Ballistic resonance and thermalization in Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou chain at finite temperature // Physical Review E.— 2020.— Vol. 101, p. 42209.

Другие публикации:

1. Kuzkin, V.A., Asonov, I.E. Vector-based model of elastic bonds for simulation of granular solids // Physical Review E.— 2012.— Vol. 86.— p. 051301.

2. Кузькин, В.А., Кривцов, А.М., Линьков, А.М. Компьютерное моделирование эффективной вязкости смеси проппант - жидкость, используемой при гидроразрыве // Физико-технические проблемы разработки полезных ископаемых.— 2014.— No. 1.— с. 3–12.
3. Кузькин, В.А., Кривцов, А.М., Линьков, А.М. Сравнительный анализ реологических свойств суспензий при компьютерном моделировании течений Пуазейля и Куэтта // Физико-технические проблемы разработки полезных ископаемых.— 2014.— No. 6.— с. 23–33.
4. Roberts-Thomson, C., Lokshin, A.M., Kuzkin, V.A. Jump detection using fuzzy logic // Proceedings of IEEE Symposium Series on Computational Intelligence.— 2016.— pp. 125–131.
5. Kuzkin, V.A., Dannert, M.M. Buckling of a column under a constant speed compression: a dynamic correction to the Euler formula // Acta Mechanica.— 2016.— Vol. 227, No. 6.— pp. 1645–1652.
6. Lapin, R.L., Kuzkin, V.A. On calculation of effective elastic properties of materials with cracks // Materials Physics and Mechanics.— 2017.— Vol. 32, No. 2.— pp. 213-221 (2017).
7. Kuzkin, V.A., Krivtsov, A.M. Enhanced vector-based model for elastic bonds in solids // Letters on materials.— 2017.— Vol. 7, No. 4.— pp. 455–458.
8. Ostanin, I., Zhilyaev, P., Petrov, V., Dumitrica, T., Eibl, S., Ruede, U., Kuzkin, V.A., Toward large scale modeling of carbon nanotube systems with the mesoscopic distinct element method // Letters on Materials.— 2018.— Vol. 8, No. 3.— pp. 240–245.
9. Lapin, R.L., Kuzkin, V.A., Kachanov, M.L. On the anisotropy of cracked solids // International Journal of Engineering Science.— 2018.— Vol. 124.— pp. 16–23.
10. ЛАПИН, Р.Л., КУЗЬКИН, В.А. Вычисление нормальной и сдвиговой податливостей трехмерной трещины с учетом контакта между берегами // Письма о материалах.— 2019.— Т. 9, No. 2.— с. 228–232.
11. Lapin, R.L., Kuzkin, V.A., Kachanov, M.L. Rough contacting surfaces with elevated contact areas // International Journal of Engineering Science.— 2019.— Vol. 145.— p. 103171.
12. Lapin, R.L., Muschak, N.D., Tsaplin, V.A., Kuzkin, V.A., Krivtsov, A.M. Estimation of energy of fracture initiation in brittle materials with Cracks. In: State of the Art and Future Trends in Material Modeling, Springer.— 2019.— pp. 173-182.