Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем машиноведения Российской академии наук

На правах рукописи

Кузькин Виталий Андреевич

# ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ С МИКРОСТРУКТУРОЙ

01.02.04 — механика деформируемого твердого тела

## ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени доктора физико-математических наук

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

Санкт-Петербург

2020

# Оглавление

#### Введение

1	Упр	ругое деформирование и эффективные упругие свойства			
	твердых тел с дефектами				
	1.1	Обзор литературы по моделированию упругого деформирования			
		тел с дефектами	19		
1.2 Уравнения равновесия решетки с вакансиями					
1.3 Поле перемещений в решетке с вакансиями		Поле перемещений в решетке с вакансиями	24		
		1.3.1 Пример. Объемное деформирование	26		
		1.3.2 Пример. Двухосное деформирование	30		
	1.4	Эффективные упругие модули (периодическое распределение ва-			
		кансий)	31		
	1.5	Эффективные упругие модули (случайное распределение вакансий)	33		
	1.6 Сравнение с континуальной теорией				
	1.7	Заключение к главе 1	39		
2 Переходные процессы в твердых телах с кристалли					
структурой		уктурой	41		
	2.1	Обзор литературы по переходным процессам в деформируемых			
		твердых телах	41		
	2.2	Переходные процессы в упругих телах со скалярной кристалли-			
		ческой решеткой	44		

6

		2.2.1	Уравнения движения и начальные условия	44	
		2.2.2	Дисперсионное соотношение	47	
		2.2.3	О распределении энергии по собственным формам	48	
		2.2.4	Уравнение динамики ковариаций скоростей	55	
		2.2.5	Колебания энергий	58	
		2.2.6	Примеры	60	
		2.2.7	Результаты параграфа 2.2	67	
	2.3 Переходные процессы в упругих телах со сложной кристаллич				
	ской решеткой			68	
		2.3.1	Матричная запись уравнений движения	69	
		2.3.2	Дисперсионное соотношение	70	
		2.3.3	Уравнение динамики ковариаций	76	
		2.3.4	Колебания кинетических энергий	79	
		2.3.5	Дополнительные законы сохранения	84	
		2.3.6	Равновесные значения кинетических энергий	85	
		2.3.7	Примеры	89	
		2.3.8	О влиянии нелинейности на переходные процессы 12	11	
		2.3.9	Результаты параграфа 2.3	13	
	2.4	.4 Заключение к главе 2			
3	Пер	оенос з	энергии в упругих твердых телах с кристаллической		
	стр	уктурс	рй 11 година 11	19	
	3.1 Обзо		литературы по переносу энергии в кристаллах 11	19	
	3.2	2 Перенос энергии в упругих телах со скалярной кристаллическо			
		решет	кой	24	
		3.2.1	Уравнения движения и начальные условия	24	
		3.2.2	Уравнение динамики ковариации скоростей	26	
		3.2.3	Точное решение уравнения динамики ковариаций 12	27	
		3.2.4	Континуализация уравнения динамики ковариаций 12	28	

	3.2.5	Примеры				
	3.2.6	Результаты параграфа 3.2				
3.3	3.3 Перенос энергии в упругих телах со сложной кристаллической					
	решеткой					
	3.3.1	Уравнения движения и начальные условия				
	3.3.2	Точное решение уравнений движения				
	3.3.3	Перенос кинетических энергий (точная формула) 166				
	3.3.4	Перенос кинетической энергии (континуальное описание) . 169				
	3.3.5	О связи с кинетической теорией описания переноса тепло-				
		вой энергии				
	3.3.6	Примеры				
	3.3.7	Результаты параграфа 3.3				
3.4 Подвод энергии в цепочку на упругом основании						
	3.4.1	Уравнение движения и начальные условия 212				
	3.4.2	Подвод энергии при силовом нагружении				
	3.4.3	Подвод энергии при кинематическом нагружении 219				
	3.4.4	Сравнение с континуальной постановкой				
	3.4.5	Результаты параграфа 3.4				
3.5	Закль	очение к главе 3				
Tom						
Teb	моупр	угие эффекты в кристаллических твердых телах 231				
4.1	Орзор	о литературы по моделированию термомеханических процес-				
	COB .					
4.2	Линейная термоупругость цепочки с учетом баллистического теп-					
	лопереноса					
	4.2.1	Континуализация уравнений динамики				
	4.2.2	Континуализация уравнения баланса энергии				
	4.2.3	Определяющие соотношения Грюнайзена и Дюамеля-				
		Неймана				

	4.2.4	Уравнения связанной линейной термоупругости цепочки . 241			
	4.2.5	О свободной энергии цепочки			
	4.2.6	О задаче с периодическим распределением температуры . 244			
	4.2.7	Пример. Цепочка Ферми-Паста-Улама (ФПУ) 245			
	4.2.8	Баллистический резонанс в цепочке ФПУ			
	4.2.9	Сравнение с результатами моделирования			
	4.2.10	О переходе механической энергии в тепловую в цепочке ФПУ253			
	4.2.11	Результаты параграфа 4.2			
4.3 Линейная термоупругость двумерных и трехмерных кри-		ная термоупругость двумерных и трехмерных кристаллов . 256			
	4.3.1	Континуализация уравнений динамики			
	4.3.2	Коэффициент теплового расширения			
	4.3.3	Условие возникновения отрицательного теплового расши-			
		рения			
	4.3.4	Результаты параграфа 4.3			
4.4	Нелин	ейные определяющие соотношения термоупругости квази-			
одномерной цепочки		ерной цепочки			
	4.4.1	Связь микро- и макропараметров			
	4.4.2	Линейное тепловое расширение			
	4.4.3	Нелинейное тепловое расширение			
	4.4.4	Пример. Тепловое расширение квазиодномерной цепочки			
		Леннарда-Джонса			
	4.4.5	Результаты параграфа 4.4			
4.5	Резулн	ьтаты главы 4			
Заключение 283					

# Введение

#### Актуальность

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 [25], А. Мазнева [80], К. Нельсона [87], Дж.А. Роджерса [174], С. Хубермана [80] и др. показывают, что на микро- и наноуровне тепловая энергия может распространяться волновым образом. 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 [181], А. Дхара [30, 89, 31], С.Н. Гаврилова [57, 58], О. Гендельмана [60, 178, 61, 62, 179, 180], М.А. Гузева [230], Е.А. Корзниковой [11], Ю.А. Косевича [123], А.М. Кривцова [239], Дж. Лебовица [22, 173], С. Лепри [135], Р. Ливи [135], О.С. Лобода [139], Я. Луккаринена [67], А. Милке [150], В. Мюллера [184], А. Полити [136, 137], А.В. Порубова [130, 139], А.В. Савина [61, 123], Л.И. Слепяна [187], Г. Спона [188], Г. Чена [24], А.Б. Фрейдина [104], П. Хеммера [70] 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 [84]. Несколько температур также обнаруживается при молекулярнодинамическом моделировании ударных волн [3, 72] и моделировании распространения тепла в сложных кристаллических решетках [117]. Моделированию термомеханического поведения материалов в сильно неравновесных условиях посвящены работы М. Аллена [2], А.К. Беляева [84], Т.В. Дудниковой [34, 35], С.Н. Гаврилова [57, 58], М.А. Гузева [230], Д.А. Индейцева [84], А.М. Кривцова [240, 244, 103], С.А. Кукушкина [125, 247], Ю.И. Мещерякова [252], С.А. Лурье [141, 250], К.Л. Муратикова [157, 158], Ю.В. Петрова [85], И. Пригожина [170], Ю.Н. Радаева [236, 237, 238], В.В. Стегайлова [126, 163], В.Е. Фортова [3, 85] и других авторов. При моделировании часто возникает необходимость описания 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 моделирования термомеханического поведения материала на микрои 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 [2] или метод подвижных клеточных автоматов [257, 259]. Большой вклад в развитие дискретных методов описания деформируемых тел внесли работы А.К. Абрамяна [1], Б.Д. Аннина [220, 221], Н.М. Бессонова [1, 83], О.В. Гендельмана [251], Р.В. Гольдштейна [228], И.Ф. Головнева [225, 226, 227], Е.И. Головневой [226, 227], А.И. Дмитриева, С.В. Дмитриева [11, 262], К.П. Зольникова [258], Е.А. Ивановой [231, 232, 233], С.Н. Коробейникова [122, 222], А.М. Кривцова [239], Л.И. Маневича [251], Н.Ф. Морозова [253], Г.Э. Нормана [126, 163], С.Г. Псахье [257], В.М. Садовского [221], В.В. Стегайлова [126, 163], П.Е. Товстика [260], В.М. Фомина [204, 225, 226, 227], В.Е. Фортова [3, 85, 261], Е.В. Шилько [183, 259] 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.

#### Цели и задачи

Основной целью настоящей работы является развитие 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 кристаллических 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 [20] второго и четвертого порядка точности соответственно.

# 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

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

## Научная новизна

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 решетки 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. Развит подход 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. Развит подход 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

#### Оглавление

переноса кинетические энергии подрешеток двухатомной цепочки отличаются. В решетке графена перенос энергии существенно анизотропен.

- 4. Развит подход 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. Развит подход 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

#### Оглавление

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 (академиксекретарь 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).

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

### Полнота изложения материала

Все результаты диссертации опубликованы в изданиях, входящих в международные базы цитирования Web of Science, Scopus или изданиях, рекомендованных ВАК России.

## Личное участие автора

По теме диссертации опубликовано 17 работ, из них 4 работы без соавторов и 13 работ в соавторстве. В большинстве работ, выполненных в соавторстве, соискателю принадлежит математическая постановка и решение задач. Концептуальная постановка и обсуждение результатов проводились совместно с соавторами.

## 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.

# Публикации по теме диссертации в изданиях, рекомендованных ВАК и индексируемых базами Web of Science и Scopus

По теме диссертации опубликовано 17 работ в изданиях, рекомендованных ВАК и индексируемых базами Web of Science и Scopus.

1. Kuzkin, V.A. Comment on negative thermal expansion in single-component systems with isotropic interactions // Journal of Physical Chemistry, 118(41),

9793-9794 (2014).

- Kuzkin, V.A., Krivtsov, A.M., Jones, R.E., Zimmerman, J.A. Material stress representation of equivalent stress tensor for discrete solids // Physical Mesomechanics, 18 (1), 13 (2015).
- 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, 252, 1664 (2015).
- Kuzkin, V.A., Kachanov, M. Contact of rough surfaces: Conductance-stiffness connection for contacting transversely isotropic half-spaces // International Journal of Engineering Science, Vol. 97, pp. 1-5 (2015).
- Kuzkin, V.A. On angular momentum balance in particle systems with periodic boundary conditions // ZAMM — Journal of Applied Mathematics and Mechanics, Vol. 95, Is. 11, pp. 1290-1295, (2015).
- 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, 96 (15), 1538-1555, (2016).
- Кузькин, В.А., Кривцов, А.М. Высокочастотные тепловые процессы в гармонических кристаллах // Доклады академии наук, Т. 472, No. 5, с. 529-533 (2017).
- Кузькин, В.А., Кривцов, А.М. Аналитическое описание переходных тепловых процессов в гармонических кристаллах // Физика твердого тела, том 59, вып. 5, с. 1023-1035 (2017).
- Kuzkin, V.A., Krivtsov, A.M. Fast and slow thermal processes in harmonic scalar lattices // Journal of Physics: Condensed Matter, 29, 505401, (2017).

- Tsaplin, V.A., Kuzkin, V.A., An asymptotic formula for displacement field in triangular lattice with vacancy // Letters on materials, 7 (4), pp. 341-344 (2017).
- 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, 97, 022217 (2018).
- Tsaplin, V.A., Kuzkin, V.A., Temperature oscillations in harmonic triangular lattice with random initial velocities // Letters on materials, 8(1), 16-20 (2018).
- Krivtsov, A.M., Kuzkin, V.A. Discrete and continuum thermomechanics.
   In: Altenbach H., Öchsner A. (eds) Encyclopedia of Continuum Mechanics.
   Springer, Berlin, Heidelberg (2018).
- Kuzkin, V.A. Thermal equilibration in infinite harmonic crystals // Continuum Mechanics and Thermodynamics, 31(5), 1401-1423. (2019).
- Kuzkin, V.A. Unsteady ballistic heat transport in harmonic crystals with polyatomic unit cell // Continuum Mechanics and Thermodynamics, 31(6), 1573-1599 (2019).
- Berinskii, I.E., Kuzkin, V.A. Equilibration of energies in a two-dimensional harmonic graphene lattice // Philosophical Transactions of the Royal Society A, Vol. 378, Is. 2162 (2019).
- Kuzkin, V.A., Krivtsov, A.M. Ballistic resonance and thermalization in Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou chain at finite temperature // Physical Review E, Vol. 101, p. 42209 (2020).

#### Другие публикации:

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

- 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, No. 1, с. 3-12 (2014).
- Кузькин, В.А., Кривцов, А.М., Линьков, А.М. Сравнительный анализ реологических свойств суспензний при компьютерном моделировании течений Пуазейля и Куэтта // Физико-технические проблемы разработки полезных ископаемых, No. 6, с. 23-33 (2014).
- Roberts-Thomson, C., Lokshin, A.M., Kuzkin, V.A. Jump detection using fuzzy logic // Proceedings of IEEE Symposium Series on Computational Intelligence, pp. 125 – 131 (2014).
- Kuzkin, V.A., Dannert, M.M. Buckling of a column under a constant speed compression: a dynamic correction to the Euler formula // Acta Mechanica, 227(6), 1645-1652 (2016).
- Lapin, R.L., Kuzkin, V.A. On calculation of effective elastic properties of materials with cracks // Materials Physics and Mechanics, No. 2, Vol. 32, pp. 213-221 (2017).
- Kuzkin, V.A., Krivtsov, A.M. Enhanced vector-based model for elastic bonds in solids // Letters on materials, 7 (4), pp. 455-458 (2017).
- 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, 8 (3), pp. 240-245 (2018).
- Lapin, R.L., Kuzkin, V.A., Kachanov, M.L. On the anisotropy of cracked solids // International Journal of Engineering Science, 124, pp. 16-23 (2018).

- Лапин, Р.Л., Кузькин, В.А. Вычисление нормальной и сдвиговой податливостей трехмерной трещины с учетом контакта между берегами // Письма о материалах, 9 (2), 2019 pp. 228-232 (2018).
- Lapin, R.L., Kuzkin, V.A., Kachanov, M.L. Rough contacting surfaces with elevated contact areas // International Journal of Engineering Science, Vol. 145, 103171 (2019).
- 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, pp. 173-182, (2019).

## Глава 1

# Упругое деформирование и эффективные упругие свойства твердых тел с дефектами

# 1.1 Обзор литературы по моделированию упругого деформирования тел с дефектами

Реальные кристаллы содержат различные дефекты, существенно влияющие на их термомеханические свойства. В настоящей главе развивается подход, позволяющий учесть влияние дефектов. Задача о влиянии дефектов на свойства кристаллов рассматривалась в литературе в рамках дискретного и континуального подходов. Основы континуальной теории дефектов были заложены в работах Эшелби [40, 41]. В континуальной теории дефекты часто моделируются как поры или включения в однородном упругом континууме. Методы теории упругости применяются для вычисления упругих полей, создаваемых дефектами [40], упругого взаимодействия дефектов [41], эффективных упругих свойств [42] и т.д. Континуальное моделирование успешно используется для описания эффективных упругих свойств [17], но в то же время может приводить к существенным сложностям на микро- и наноуровне, где важную роль играет дискретность решетки [228, 167]. В частности, в работе [242] было показано, что эффект дискретности может быть значительным даже при отсутствии поверхностного натяжения [39]. Одна из первых работ, посвященных расчету полей перемещений в кристаллах с вакансиями в дискретной постановке, принадлежит Канзаки [88]. В работе [88] рассматривалась периодическая ячейка кристалла, содержащая вакансию в центре. Влияние вакансии учитывалось за счет приложения дополнительных внешних сил к атомам ячейки, близким к вакансии. Уравнения равновесия решетки решались с использованием дискретного преобразования Фурье. Подход Канзаки и его модификации (см. например [52]) широко использовались для исследования влияния вакансий и межузельных атомов в металлах [68, 69, 53, 54, 55, 153] и сплавах [172]. Обобщение метода [88] на случай нелинейных межчастичных взаимодействий проводилось в работах [49, 215, 94]. Другой подход, основанный на использовании дискретной функции Грина, предложен в работе [195]. В данной работе было показано, что метод эквивалентен методу Канзаки, но при этом проще с вычислительной точки зрения. Дискретная функция Грина вычислялась для многих систем, включая треугольную решетку [196, 133], решетку алмаза [213], графен [214] и гранецентрированную кубическую решетку [151]. Однако явное выражение для поля перемещений в треугольной решетке получено не было.

В настоящей главе используется альтернативная постановка задачи о деформировании кристалла с вакансиями. Рассматривается наложение средней деформации на ячейку периодичности кристалла, содержащую одиночную вакансию. В отличие от методов [88, 195], перемещения частиц ячейки выражаются через среднюю деформацию. Данная постановка аналогична двоякопериодической задаче теории упругости, рассмотренной, например, в монографиях [254, 229, 249]. Для примера рассматривается деформирование треугольной решетки. Получаются точные и приближенные формулы для поля перемещений решетки при различных видах деформирования. Численно исследуется деформирование решетки со случайным распределением вакансий. На основе полученных полей перемещений вычисляются эффективные упругие модули решетки и коэффициенты концентрации. Обсуждается возможность описания эффективных упругих свойств решетки и коэффициентов концентрации в рамках континуальной теории упругости. Основные результаты, полученные в данной главе, опубликованы в работах [114, 198].

# 1.2 Уравнения равновесия решетки с вакансиями

В данном параграфе выводятся уравнения равновесия для треугольной решетки с двояко-периодической системой вакансий под воздействием нагрузки, приложенной на бесконечности (Рис. 1.1). Периодическая ячейка имеет форму ромба со стороной, содержащей 2N + 1 частиц. Вакансия располагается в центре ромба. Предполагается, что каждый атом взаимодействует только с ближайшими соседями посредством линейных сил. Далее перемещения частиц в ячейке периодичности выражаются через среднюю деформацию ячейки.

Уравнения равновесия решетки записываются в разностном виде. Для этого вводятся единичные векторы  $\mathbf{e}_u$ ,  $\mathbf{e}_v$ ,  $\mathbf{e}_w$ , соответствующие направлениям связей в решетке:

$$\mathbf{e}_u = \frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{i} + \frac{1}{2}\mathbf{j}, \quad \mathbf{e}_v = -\frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{i} + \frac{1}{2}\mathbf{j}, \quad \mathbf{e}_w = \mathbf{e}_u + \mathbf{e}_v, \quad (1.1)$$

где  $\mathbf{i}, \mathbf{j}$  — единичные векторы двумерного декартова базиса, соответствующие осям x и y (см. Рис. 1.1);  $\mathbf{I} = \mathbf{i}\mathbf{i} + \mathbf{j}\mathbf{j} = \frac{2}{3}(\mathbf{e}_u\mathbf{e}_u + \mathbf{e}_v\mathbf{e}_v + \mathbf{e}_w\mathbf{e}_w)$  — двумерный единичный тензор. Во введенном базисе любой двумерный вектор,  $\mathbf{u}$ , представляется



Рис. 1.1: Треугольная решетка с двояко-периодической системой вакансий (N = 2). Сплошная линия ограничивает ячейку периодичности.

в виде:

$$\mathbf{u} = \frac{2}{3}(u\mathbf{e}_u + v\mathbf{e}_v + w\mathbf{e}_w), \quad u = \mathbf{u} \cdot \mathbf{e}_u, \quad v = \mathbf{u} \cdot \mathbf{e}_v, \quad w = \mathbf{u} \cdot \mathbf{e}_w = u + v.$$
(1.2)

Введем индексы *n*, *m*, нумерующие частицы таким образом, что радиус-векторы частиц ячейки периодичности имеют вид:

$$\mathbf{r}^{n,m} = a(n\mathbf{e}_u + m\mathbf{e}_v),\tag{1.3}$$

где a — равновесное расстояние между ближайшими соседями. Рассмотрим разностные операторы второго порядка  $\Delta_u$ ,  $\Delta_v$ ,  $\Delta_w$ , соответствующие направлениям u, v, w:

$$\Delta_{u}(\mathbf{u}^{n,m}) = \mathbf{u}^{n+1,m} - 2\mathbf{u}^{n,m} + \mathbf{u}^{n-1,m}, \quad \Delta_{v}(\mathbf{u}^{n,m}) = \mathbf{u}^{n,m+1} - 2\mathbf{u}^{n,m} + \mathbf{u}^{n,m-1},$$
  
$$\Delta_{w}(\mathbf{u}^{n,m}) = \mathbf{u}^{n+1,m+1} - 2\mathbf{u}^{n,m} + \mathbf{u}^{n-1,m-1}.$$
(1.4)

С использованием данных операторов уравнения равновесия частицы n, m, име-

ющей 6 ближайших соседей, представляются следующим образом:

$$\Delta_u u^{n,m} \mathbf{e}_u + \Delta_v v^{n,m} \mathbf{e}_v + \Delta_w w^{n,m} \mathbf{e}_w = 0.$$
(1.5)

Проецируя данное уравнение на базисные векторы  $\mathbf{e}_u, \mathbf{e}_v$ , получим:

$$\Delta_{u}u^{n,m} + \Delta_{w}(u^{n,m} + v^{n,m}) = 0,$$
(1.6)  

$$\Delta_{v}v^{n,m} + \Delta_{w}(u^{n,m} + v^{n,m}) = 0.$$

Уравнения (1.6) описывают равновесие частиц, имеющих шесть ближайших соседей, в отсутствии объемных сил.

Рассмотрим теперь вакансию, расположенную в точке **r**<sup>0,0</sup> = 0. Частицы, окружающие вакансию, имеют только пять ближайших соседей. Следовательно их уравнения равновесия отличаются от уравнений равновесия частиц, далеких от вакансии. Для того чтобы записать уравнения равновесия всех частиц ячейки периодичности в едином виде, вводятся следующие операторы удаления связей:

$$\beta_{u}^{\pm} \mathbf{u}^{n,m} = \delta^{n,m} (\mathbf{u}^{n\pm1,m} - \mathbf{u}^{n,m}) + \delta^{n\mp1,m} (\mathbf{u}^{n\mp1,m} - \mathbf{u}^{n,m}),$$
  

$$\beta_{v}^{\pm} \mathbf{u}^{n,m} = \delta^{n,m} (\mathbf{u}^{n,m\pm1} - \mathbf{u}^{n,m}) + \delta^{n,m\mp1} (\mathbf{u}^{n,m\mp1} - \mathbf{u}^{n,m}),$$
  

$$\beta_{w}^{\pm} \mathbf{u}^{n,m} = \delta^{n,m} (\mathbf{u}^{n\pm1,m\pm1} - \mathbf{u}^{n,m}) + \delta^{n\mp1,m\mp1} (\mathbf{u}^{n\mp1,m\mp1} - \mathbf{u}^{n,m}).$$
  
(1.7)

Здесь  $\delta^{n,m} = 1$  для n = m = 0 и  $\delta^{n,m} = 0$  для остальных n, m из ячейки периодичности. С использованием введенных операторов удаления связей уравнения равновесия любой частицы  $\{n, m\}$  можно записать в виде:

$$(\Delta_u - \beta_u^+ - \beta_u^-)u^{n,m} + (\Delta_w - \beta_w^+ - \beta_w^-)(u^{n,m} + v^{n,m}) = 0,$$
  

$$(\Delta_v - \beta_v^+ - \beta_v^-)v^{n,m} + (\Delta_w - \beta_w^+ - \beta_w^-)(u^{n,m} + v^{n,m}) = 0.$$
(1.8)

Данная формула показывает, что введение операторов удаления связей эквива-

лентно введению пружинок с отрицательными жесткостями.

Таким образом, уравнение (1.8) описывает равновесие ячейки периодичности. Для замыкания в следующем параграфе к нему добавляются периодические граничные условия.

#### 1.3 Поле перемещений в решетке с вакансиями

В настоящем параграфе уравнения равновесия (1.8) решаются аналитически.

Введем средний тензор деформации ячейки периодичности  $\varepsilon$ , получающийся при воздействии на решетку нагрузок, приложенных на бесконечности. Перемещения частиц представляются в виде суммы двояко-периодической части  $\widetilde{\mathbf{u}}^{n,m}$  и линейной функции тензора деформации  $\varepsilon$  [249]:

$$\mathbf{u}^{n,m} = \widetilde{\mathbf{u}}^{n,m} + a\boldsymbol{\varepsilon} \cdot (n\mathbf{e}_u + m\mathbf{e}_v), \qquad \widetilde{\mathbf{u}}^{n+\alpha(2N+1),m+\beta(2N+1)} = \widetilde{\mathbf{u}}^{n,m}, \tag{1.9}$$

где  $\alpha$  и  $\beta$  — целые числа. Данное выражение подставляется в уравнения равновесия (1.8). Подстановка дает уравнения для двояко-периодической части перемещений  $\widetilde{\mathbf{u}}^{n,m}$ :

$$(\Delta_u - \beta_u^+ - \beta_u^-)\widetilde{u}^{n,m} + (\Delta_w - \beta_w^+ - \beta_w^-)(\widetilde{u}^{n,m} + \widetilde{v}^{n,m}) = d_u + d_w,$$
  

$$(\Delta_v - \beta_v^+ - \beta_v^-)\widetilde{v}^{n,m} + (\Delta_w - \beta_w^+ - \beta_w^-)(\widetilde{u}^{n,m} + \widetilde{v}^{n,m}) = d_v + d_w,$$
  

$$n, m = -N, ..., N,$$
  
(1.10)

$$d_{u} = \varepsilon_{u} a(\delta^{n-1,m} - \delta^{n+1,m}), \quad d_{v} = \varepsilon_{v} a(\delta^{n,m-1} - \delta^{n,m+1}),$$
$$d_{w} = \varepsilon_{w} a(\delta^{n-1,m-1} - \delta^{n+1,m+1}), \quad \varepsilon_{s} = \mathbf{e}_{s} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{e}_{s}, \quad s = u, v, w.$$

В результате получается система из  $2(2N+1)^2$  уравнений для перемещений. Решение системы (1.10) ищется с использованием дискретного преобразования Фурье. Это позволяет автоматически удовлетворить периодическим граничным

(1.11)

условиям (1.9).

Прямое и обратное дискретное преобразование Фурье определяются формулами:

$$Z^{s,p} = \Phi(z^{n,m}) = \sum_{n,m=-N}^{N} z^{n,m} \xi^{-sn-mp}, \qquad \xi = e^{i\theta}, \qquad \theta = \frac{2\pi}{2N+1},$$
  
$$z^{n,m} = \Phi^{-1}(Z^{s,p}) = \frac{1}{(2N+1)^2} \sum_{s,p=-N}^{N} Z^{s,p} \xi^{sn+mp},$$
  
(1.12)

где і — мнимая единица. Применяя дискретное преобразование Фурье, получим систему для образов  $U^{s,p} = \Phi(u^{n,m}), V^{s,p} = \Phi(v^{n,m})$ :

$$\left(\sin^2 \frac{s\theta}{2} + \sin^2 \frac{(s+p)\theta}{2}\right) U^{s,p} + \sin^2 \frac{(s+p)\theta}{2} V^{s,p} = Q_1,$$

$$\sin^2 \frac{(s+p)\theta}{2} U^{s,p} + \left(\sin^2 \frac{p\theta}{2} + \sin^2 \frac{(s+p)\theta}{2}\right) V^{s,p} = Q_2,$$
(1.13)

Правая часть данной системы определяется формулами:

$$Q_{1} = Y^{s,p} - \frac{ia}{2} \left( \varepsilon_{u} \sin s\theta + \varepsilon_{w} \sin(s+p)\theta \right),$$

$$Q_{2} = Y^{p,s} - \frac{ia}{2} \left( \varepsilon_{v} \sin p\theta + \varepsilon_{w} \sin(s+p)\theta \right),$$

$$Y^{s,p} = \frac{1}{4} \left[ \widetilde{w}^{1,1} (\xi^{-p-s} - 1) + \widetilde{w}^{-1,-1} (\xi^{p+s} - 1) + \widetilde{u}^{1,0} (\xi^{-s} - 1) + \widetilde{u}^{-1,0} (\xi^{s} - 1) \right].$$
(1.14)

Отметим, что для s=p=0 уравнения удовлетворяются автоматически, следовательно  $U^{0,0}, V^{0,0}$  — произвольные. Определитель системы имеет вид:

$$D^{s,p} = \sin^2 \frac{s\theta}{2} \sin^2 \frac{p\theta}{2} + \sin^2 \frac{p\theta}{2} \sin^2 \frac{(s+p)\theta}{2} + \sin^2 \frac{s\theta}{2} \sin^2 \frac{(s+p)\theta}{2}.$$
 (1.15)

Решая систему уравнений для образов и применяя обратное дискретное преобразование Фурье, получим точные формулы для двояко-периодической части перемещений:

$$\widetilde{u}^{n,m} = \Phi^{-1} \left( \frac{1}{D^{s,p}} \left[ Q_1 \left( \sin^2 \frac{p\theta}{2} + \sin^2 \frac{(s+p)\theta}{2} \right) - Q_2 \sin^2 \frac{(s+p)\theta}{2} \right] \right),$$

$$\widetilde{v}^{n,m} = \Phi^{-1} \left( \frac{1}{D^{s,p}} \left[ Q_2 \left( \sin^2 \frac{s\theta}{2} + \sin^2 \frac{(s+p)\theta}{2} \right) - Q_1 \sin^2 \frac{(s+p)\theta}{2} \right] \right).$$
(1.16)

Формула (1.16) дает общее решение двояко-периодической задачи для треугольной решетки с вакансиями.

#### 1.3.1 Пример. Объемное деформирование

Рассмотрим случай объемного деформирования ячейки периодичности, т.е. ε = εI. Исследуем эффект упругого взаимодействия вакансий. Для этого проводится сравнение поля перемещений для бесконечной решетки с одиночной вакансией с полем перемещений конечной ячейки периодичности. Решение для бесконечной решетки обозначается индексом ∞.

В случае объемного деформирования выполняется:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \varepsilon \mathbf{I}, \qquad \varepsilon_u = \varepsilon_v = \varepsilon_w = \varepsilon.$$
 (1.17)

В силу симметрии задачи перемещения частиц, окружающих вакансию, удовлетворяют тождествам:

$$\widetilde{\mathbf{u}}^{1,0} = -\widetilde{\mathbf{u}}^{-1,0} = \widetilde{u}^{1,0}\mathbf{e}_u, \quad \widetilde{\mathbf{u}}^{0,1} = -\widetilde{\mathbf{u}}^{0,-1} = \widetilde{u}^{1,0}\mathbf{e}_v, \quad \widetilde{\mathbf{u}}^{1,1} = -\widetilde{\mathbf{u}}^{-1,-1} = \widetilde{u}^{1,0}\mathbf{e}_w.$$
(1.18)

В таком случае правая часть уравнения (1.13) принимает вид:

$$Q_1(s,p) = -\frac{i(a\varepsilon + \tilde{u}^{1,0})}{2} [\sin s\theta + \sin(s+p)\theta], \qquad Q_2(s,p) = Q_1(p,s).$$
(1.19)

Решая уравнение (1.13) с использованием (1.19) и применяя обратное преобра-

зование Фурье, получим:

$$\widetilde{u}^{n,m} = \widetilde{v}^{m,n} = -\left(a\varepsilon + \widetilde{u}^{1,0}\right)G^{n,m},$$

$$G^{n,m} = \frac{1}{2(2N+1)^2}\sum_{s,p=-N}^{N}\frac{\sin((sn+pm)\theta)}{D^{s,p}}\left(\sin p\theta \sin^2\frac{s\theta}{2} - \sin s\theta \sin^2\frac{(s+p)\theta}{2}\right)$$
(1.20)

Для того чтобы исключить  $\tilde{u}^{1,0}$ , подставим n = 1, m = 0. В результате перемещения в треугольной решетке в случае объемного деформирования имеют вид:

$$u^{n,m} = v^{m,n} = a\varepsilon \left( n - \frac{m}{2} - \frac{G^{n,m}}{1 + G^{1,0}} \right).$$
(1.21)

$$G^{n,m} = \frac{1}{2(2N+1)^2} \sum_{s,p=-N}^{N} g(s\theta, p\theta) \sin((sn+pm)\theta), \quad \theta = \frac{2\pi}{2N+1},$$
  
$$g(x,y) = \frac{\sin y \sin^2 \frac{x}{2} - \sin x \sin^2 \frac{x+y}{2}}{\sin^2 \frac{x}{2} \sin^2 \frac{y}{2} + \sin^2 \frac{x}{2} \sin^2 \frac{x+y}{2} + \sin^2 \frac{y}{2} \sin^2 \frac{x+y}{2}}.$$
 (1.22)

Отметим, что сумма (1.22) быстро сходится с увеличением N. В частности, для частиц, окружающих вакансию, предельное значение, соответствующее  $N \to \infty$ , практически достигается уже при  $N \sim 10$  (see Fig. 1.2a). В случае бесконечной ячейки периодичности  $G^{n,m}$  определяется следующим интегралом:

$$G_{\infty}^{n,m} = \frac{1}{8\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} g(x,y) \sin(nx+my) \mathrm{d}x \mathrm{d}y.$$
(1.23)

Формулы (1.21)-(1.23) дают точные выражения для перемещений частиц.

Рассмотрим перемещение частицы, соседней с вакансией. Вычисляя предел $N \to \infty$  (бесконечная ячейка) в формулах (1.21)–(1.23), получим:

$$u_{\infty}^{1,0} \approx 1.642a\varepsilon. \tag{1.24}$$

Здесь а  $\varepsilon$  — перемещение той же частицы в случае отсутствия вакансии.

Для оценки влияния упругого взаимодействия вакансий проведем сравнение

перемещений частиц вблизи вакансии при N = 1 (минимальный размер ячейки периодичности) и  $N \to \infty$  (одиночная вакансия в бесконечной решетке). Вычисления показывают, что различие составляет около 20% (Рис. 1.2а).

Сравним теперь результаты, полученные с использованием дискретной модели, с аналогичными результатами континуальной теории упругости. Поле перемещений в пластине с коэффициентом Пуассона  $\nu_0 = 1/3$  (соответствующим треугольной решетке), содержащей круговое отверстие радиуса R, нагруженной приложенным на бесконечности гидростатическим напряжением  $\sigma_0$  (задача Кирша), имеет вид:

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{e}_r = \varepsilon r + 2 \frac{\varepsilon R^2}{r}, \qquad \varepsilon = \frac{\sigma_0}{2K_0},$$
(1.25)

где r — расстояние от центра отверстия,  $\mathbf{e}_r = \mathbf{r}/r$ ,  $K_0$  — модуль объемного сжатия.

Перемещения частиц в решетке могут быть представлены в аналогичном виде:

$$\mathbf{u}^{n,m} \cdot \mathbf{e}_r = \varepsilon r + \widetilde{\mathbf{u}}^{n,m} \cdot \mathbf{e}_r. \tag{1.26}$$

Первое слагаемое в формуле (1.25) совпадает с аналогичным континуальным выражением (1.26). Проверим, на каком расстоянии от вакансии второе слагаемое  $\widetilde{\mathbf{u}}^{n,m} \cdot \mathbf{e}_r$  может быть аппроксимировано функцией A/r.

Рис. 1.2b показывает зависимость радиальной компоненты  $\tilde{\mathbf{u}}^{n,m} \cdot \mathbf{e}_r$  от безразмерного расстояния r/a до центра вакансии при N = 100. В силу линейности задачи для простоты в расчетах используется значение  $\varepsilon = 1$ . Круги показывают аналитическое решение дискретной задачи. Линии показывают аналогичные континуальные зависимости. Для наилучшего совпадения коэффициент A выбран равным  $0.604a^2$ . Видно, что при r/a > 10 перемещения частиц хорошо описываются континуальной теорией. В соответствии с формулой (1.25), коэффициент А определяет эквивалентный радиус вакансии:

$$R \approx 0.55a. \tag{1.27}$$

Основное отличие дискретного и континуального решений показано на Рис. 1.2b. В окрестности вакансии зависимость  $u_r(r/a)$  немонотонна. Данный факт показывает, что вблизи вакансии континуальная теория неприменима. Похожий эффект обнаружен в квантово-механических расчетах, проведенных в работе [149] для никеля. Дальнейшее обсуждение сложностей, связанных с ис-



Рис. 1.2: Объемное деформирование треугольной решетки с вакансией. Полное перемещение частицы 1,0, граничащей с вакансией (n = 1, m = 0) в зависимости от размера ячейки периодичности N (слева). Радиальная часть перемещения  $\widetilde{\mathbf{u}}^{n,m} \cdot \mathbf{e}_r$  в зависимости от безразмерного расстояния r/a от центра вакансии при N = 100 (справа).

пользованием континуальной теории, приведено в параграфе 1.6, где рассчитываются коэффициенты концентрации вблизи вакансии.

#### 1.3.2 Пример. Двухосное деформирование

Рассмотрим двухосное деформирование ячейки периодичности, при котором средний тензор напряжений имеет вид:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{\varepsilon_{xx}}{3} (\mathbf{e}_u - \mathbf{e}_v) (\mathbf{e}_u - \mathbf{e}_v) + \varepsilon_{yy} \mathbf{e}_w \mathbf{e}_w, \qquad \varepsilon_u = \varepsilon_v = \frac{3\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}}{4}, \qquad \varepsilon_w = \varepsilon_{yy}.$$
(1.28)

Вычислим поле перемещений в случае двухосного деформирования вдоль направлений  $\mathbf{i} = (\mathbf{e}_u - \mathbf{e}_v)/\sqrt{3}$  и  $\mathbf{j} = \mathbf{e}_u + \mathbf{e}_v$ . Представим тензор напряжений в базисе, связанном с решеткой:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{\varepsilon_{xx}}{3} (\mathbf{e}_u - \mathbf{e}_v) (\mathbf{e}_u - \mathbf{e}_v) + \varepsilon_{yy} \mathbf{e}_w \mathbf{e}_w, \qquad \varepsilon_u = \varepsilon_v = \frac{3\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}}{4}, \qquad \varepsilon_w = \varepsilon_{yy}.$$
(1.29)

В силу симметрии задачи перемещения частиц, граничащих с вакансией, удовлетворяют тождествам:

$$\widetilde{u}^{1,0} = -\widetilde{u}^{-1,0}, \quad \widetilde{v}^{0,1} = -\widetilde{v}^{0,-1}, \quad \widetilde{u}^{1,0} = \widetilde{v}^{0,1}, \quad \widetilde{w}^{1,1} = -\widetilde{w}^{-1,-1}.$$
(1.30)

Иными словами, в качестве независимых неизвестных можно взять, например,  $\widetilde{u}^{1,0}, \ \widetilde{w}^{1,1}$ . Правая часть уравнения (1.13) дает:

$$Q_1(s,p) = Q_2(p,s) = -\frac{i}{2} \left[ (a\varepsilon_u + \widetilde{u}^{1,0}) \sin s\theta + (a\varepsilon_w + \widetilde{w}^{1,1}) \sin(s+p)\theta \right].$$
(1.31)

Тогда двояко-периодическая часть вектора перемещений имеет вид:

$$\widetilde{u}^{n,m} = \widetilde{v}^{m,n} = H^{n,m}(a\varepsilon_u + \widetilde{u}^{1,0}) + K^{n,m}(a\varepsilon_w + \widetilde{w}^{1,1}), \qquad (1.32)$$

где  $H^{n,m}, K^{n,m}$  определяются формулой:

$$H^{n,m} = \frac{1}{2(2N+1)^2} \sum_{s,p=-N}^{N} \frac{\sin((sn+pm)\theta)}{D^{s,p}} \left( \sin s\theta \sin^2 \frac{p\theta}{2} + \sin^2 \frac{(s+p)\theta}{2} (\sin s\theta - \sin p\theta) \right), \\
 K^{n,m} = \frac{1}{2(2N+1)^2} \sum_{s,p=-N}^{N} \frac{\sin((sn+pm)\theta)}{D^{s,p}} \sin((s+p)\theta) \sin^2 \frac{p\theta}{2}, \\
 D^{s,p} = \sin^2 \frac{s\theta}{2} \sin^2 \frac{p\theta}{2} + \sin^2 \frac{p\theta}{2} \sin^2 \frac{(s+p)\theta}{2} + \sin^2 \frac{s\theta}{2} \sin^2 \frac{(s+p)\theta}{2}.$$
(1.33)

Подстановка n = 1, m = 0 и n = 1, m = 1 в формулу (1.32) дает систему уравнений для  $\tilde{u}^{1,0}, \tilde{w}^{1,1}$ . Решение данной системы имеет вид:

$$\widetilde{u}^{1,0} = a \frac{(H^{1,0}(1-2K^{1,1})+2H^{1,1}K^{1,0})\varepsilon_u + K^{1,0}\varepsilon_w}{(1-H^{1,0})(1-2K^{1,1})-2K^{1,0}H^{1,1}},$$

$$\widetilde{w}^{1,1} = 2a \frac{H^{1,1}\varepsilon_u + (K^{1,1}(1-H^{1,0})+H^{1,1}K^{1,0})\varepsilon_w}{(1-H^{1,0})(1-2K^{1,1})-2K^{1,0}H^{1,1}}.$$
(1.34)

В случае бесконечной решетки  $N \to \infty$  суммы в формулах (1.33) можно заменить на интегралы, аналогичные (1.23). В следующих параграфах данные выражения используются для вычисления эффективных упругих модулей и коэффициентов концентрации.

# 1.4 Эффективные упругие модули (периодическое распределение вакансий)

Рассмотрим влияние вакансий на эффективные упругие модули решетки. В силу гексагональной симметрии упругие свойства изотропны. Для определения эффективного модуля объемного сжатия K и модуля сдвига  $\mu$  достаточно рассмотреть два случая: объемное деформирование  $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy}$  и сжатие с растяжением  $\varepsilon_{xx} = -\varepsilon_{yy}$ . С использованием закона Гука упругие модули выражаются через средний вектор напряжений **T** на границе ячейки периодичности с нормалью **n**:

$$K = \frac{1}{2} \frac{\mathbf{T} \cdot \mathbf{n}}{\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{n}} |_{\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy}}, \qquad \mu = \frac{1}{2} \frac{\mathbf{T} \cdot \mathbf{n}}{\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{n}} |_{\varepsilon_{xx} = -\varepsilon_{yy}}, \qquad \mathbf{n} = \frac{1}{2} (\mathbf{i} + \sqrt{3}\mathbf{j}). \quad (1.35)$$

Вектор напряжения определяется как средняя сила на границе ячейки периодичности. Суммируя силы, действующие в направлениях  $\mathbf{e}_u$ ,  $\mathbf{e}_w$ , получим:

$$\mathbf{T} = T_u \mathbf{e}_u + T_w \mathbf{e}_w, \qquad T_u = \frac{c}{4} (3\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}) + \frac{c}{(2N+1)a} \sum_{m=-N}^{N} (\widetilde{u}^{-N,m} - \widetilde{u}^{N,m}),$$
$$T_w = c\varepsilon_{yy} + \frac{c}{(2N+1)a} \sum_{m=-N}^{N} (\widetilde{w}^{-N,m+1} - \widetilde{w}^{N,m}).$$
(1.36)

Здесь c — жесткость связи;  $aT_u, aT_w$  — средние силы в связях, направленных вдоль  $\mathbf{e}_u$  и  $\mathbf{e}_w$  соответственно. Величины  $T_u, T_w$  вычисляются с использованием решения в перемещениях (1.32). В результате упругие модули вычисляются с помощью подстановки формул (1.32), (1.36) в (1.35).



Рис. 1.3: Зависимость эффективного коэффициента Пуассона и модуля объемного сжатия (нормированных на значения для идеальной решетки) от размера ячейки периодичности N. C увеличением N концентрация вакансий уменьшается.

Рис. 1.3 показывает сходимость упругих модулей к значениям, соответствующим идеальной решетке без вакансий. В параграфе 1.6 проводится сравнение

с аналогичными результатами, полученными с использованием континуальной теории.

# 1.5 Эффективные упругие модули (случайное распределение вакансий)

В настоящем параграфе эффективные упругие модули треугольной решетки со случайным распределением вакансий вычисляются на основе молекулярнодинамического моделирования. Как и ранее, взаимодействия между частицами моделируются линейными пружинками с жесткостью *с*. Учитываются только взаимодействия ближайших соседей. Рассматривается квадратная ячейка периодичности [118], содержащая большое число вакансий (Рис. 1.4). С вычислительной точки зрения удобнее получать решение статической задачи как предельный случай решения динамической задачи с диссипацией. В начальный момент времени частицы имеют случайные начальные скорости, равномерно распределенные в круге радиуса *v*<sub>0</sub>. Уравнения движения решаются численно с использованием симплектического интегратора leap-frog.

Эффективные упругие модули решетки вычисляются следующим образом. В начальный момент времени на ячейку периодичности накладывается однородная деформация. Для вычисления модуля объемного сжатия и модуля сдвига рассматриваются два случая:  $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy}$  и  $\varepsilon_{xx} = -\varepsilon_{yy}$ . При наличии вакансий однородная деформация решетки не является равновесной конфигурацией. Возникающие движения в решетке гасятся за счет сил вязкого трения. После того как колебания решетки затухнут, вычисляется средний вектор напряжения в сечении с нормалью  $\mathbf{n} = \mathbf{j}$ . При известном векторе напряжений упругие модули вычисляются по формуле (1.35). При моделировании используются следующие



Рис. 1.4: Треугольная решетка со случайным распределением вакансий. Пористость определяется как число удаленных частиц, отнесенное к полному числу частиц в образце: (a) p = 0.01, (b) p = 0.025, (c) p = 0.05, (d) p = 0.1.

значения параметров:

$$M = 2.25 \cdot 10^4, \quad \varepsilon_{xx} = \pm \varepsilon_{yy} = \pm 10^{-5}, \quad \frac{b}{b_0} = 5 \cdot 10^{-3}, \quad \frac{\Delta t}{T_*} = 0.02,$$
  
$$\frac{v_0}{v_s} = 10^{-4}, \quad s_{max} = 25 \cdot 10^3.$$
 (1.37)

где M — число частиц;  $v_s = a/T_*$ ;  $T_*$  — период колебаний одной частицы на пружинке жесткости c;  $b_0 = 2\sqrt{mc}$  — критический коэффициент диссипации;  $\Delta t$  — шаг интегрирования;  $s_{max}$  — число шагов интегрирования. Для каждого значения пористости проводится 10 расчетов с различными распределениями вакансий. Результаты осредняются по данным реализациям. Значения эффективных упругих модулей треугольной решетки со случайным распределением вакансий приведены на рис. 1.5. В частности, рис. 1.5 показывает, что при одинаковой пористости решетка с периодическим распределением вакансий более жесткая, чем решетка со случайным распределением вакансий. Для случайного распределения вакансий зависимости упругих модулей от пористости близки к линейным, в то время как для периодического распределения вакансий они заметно нелинейные. В параграфе 1.6 результаты молекулярно-динамического моделирования сравниваются с результатами расчетов по континуальной теории.

## 1.6 Сравнение с континуальной теорией

Рассмотрим вопрос о возможности замены решетки с вакансиями двумерной сплошной средой с отверстиями. В частности, определим эффективную форму данных отверстий. Данный вопрос будет рассматриваться с точки зрения эффективных упругих модулей и коэффициентов концентрации.

Для решетки пористость определяется как число удаленных частиц, отнесенное к полному числу частиц в случае отсутствия вакансий. В частности, в случае периодического распределения вакансий, пористость имеет вид  $p = 1/(2N+1)^2$ , где N — параметр, определяющий размер ячейки периодичности. В случае двумерного континуума с отверстиями, пористость определяется как доля площади, занятая отверстиями. В обоих случаях пористость может быть измерена экспериментально с помощью определения массы образца.

В континуальных моделях (см. например, работы [92, 93, 37, 38]) эффективные упругие свойства зависят от формы пор. При заданной площади наименьший эффект на упругие модули оказывают круглые поры. Рисунок 1.5 показывает, что вакансии не могут быть аппроксимированы круглыми порами, т.к. данная форма поры приводит к существенным различиям в эффективных упругих модулях. Следовательно, для лучшего соответствия должна использоваться другая форма эквивалентной поры.

Вклад поры в эффективные упругие модули определяется факторами формы  $h_1, h_2$ . Для нескольких форм поры данные факторы рассчитаны в работах [93, 37, 38]. Отметим также, что в работе [93] было показано, что вогнутость пор существенно влияет на эффективные упругие свойства (при одной площади вогнутые поры оказывают более сильное влияние на упругие модули, чем выпуклые). Иными словами, упругие свойства материала с порами зависят не только от пористости p, но и от факторов формы. В приближении невзаимодействия эффективные упругие модули материала с порами имеют вид:

$$E = \frac{E_0}{1+2h_1p}, \qquad K = \frac{K_0}{1+2(h_1-h_2)p/(1-\nu_0)},$$
  

$$\nu = \frac{\nu_0 + 2h_2p}{1+2h_1p}, \qquad \mu = \frac{\mu_0}{1+2(h_1+h_2)p/(1+\nu_0)},$$
(1.38)

где факторы формы  $h_1$ ,  $h_2$  для нескольких выпуклых и невыпуклых полигональных форм приведены в работах [93, 37, 38]. Для круга  $h_1 = 1.5$ ,  $h_2 = 0.5$ ; для других форм  $h_i$  больше, чем для круга.

В случае, если факторы формы берутся такими же как для круглых пор, получается большое отличие от результатов дискретного моделирования. Хорошее соответствие континуальных и дискретных результатов получается при  $h_1 =$ 2.036,  $h_2 = 0.810$ . Отметим однако, что не ясно какая геометрия поры соответствует таким факторам формы. Также обратим внимание на то, что коэффициент Пуассона увеличивается с ростом пористости. В поликристаллических материалах наблюдается обратный эффект [100].

Таким образом, при моделировании упругих свойств треугольная решетка с вакансиями может быть заменена двумерной сплошной средой с порами. Однако при этом поры имеют некруглую форму. Соответствующие факторы формы могут быть определены, исходя из наилучшего соответствия эффективных упругих модулей решетки и континуума. Однако саму форму таким способом определить не удается.


Рис. 1.5: Зависимость упругих модулей от пористости для треугольной решетки с двояко-периодической системой вакансий (см. параграф 1.4) и случайным распределением вакансий (см. параграф 1.5): (а) коэффициент Пуассона, (b) модуль объемного сжатия. Упругие модули нормированы на их значения при отсутствии вакансий. Показаны результаты сравнения с результатами континуальной теории при наилучшем выборе факторов формы пор (сплошная линия) и для круглых пор (пунктирная линия).

Наличие отверстия в пластине приводит к концентрации напряжений. В частности, коэффициент концентрации напряжений для пластины с круглым отверстием при всестороннем растяжении равен 2 во всех точках круга. Для других форм максимальное значение концентрации напряжений выше, чем для круга. Вакансия производит аналогичный эффект. Однако вычисление коэффициента концентрации напряжений затрудняется тем, что тензор напряжений для дискретной среды определен неоднозначно [111], [106]. Поэтому вводится коэффициент концентрации деформаций, k, определяемый 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 деформаций, kvol, вычисляется с использованием поля перемещений (1.24):

$$k_{vol} = \frac{u_{\infty}^{1,0}}{a\varepsilon} \approx 1.642, \qquad (1.39)$$

Видно, что полученное значение существенно ниже, чем значение, соответствующее круглому отверстию. В случае замены вакансии некруглой порой, соответствующей факторам формы полученным выше, отличие получится еще больше.

Для других видов деформирования отличия между континуальной и дискретной теориями еще более существенные. Рассмотрим, например, одноосное нагружение решетки в горизонтальном (y) и вертикальном (x) направлениях (см. рис. 1.1). Средние деформации, соответствующие одноосному деформированному состоянию в направлении y, имеют вид:

$$\varepsilon_{xx} = -\nu_0 \varepsilon, \quad \varepsilon_{yy} = \varepsilon, \quad \nu_0 = \frac{1}{3} \quad \Rightarrow \quad \varepsilon_u = \varepsilon_v = 0, \quad \varepsilon_w = \varepsilon.$$
 (1.40)

Как и ожидалось, максимальное удлинение наблюдается в связях, ограничивающих вакансию (рис. 1.6а). Соответствующий коэффициент концентрации деформаций, вычисленный с использованием формул (1.32), (1.33), равен:

$$k_y \approx 1.283. \tag{1.41}$$

Видно, что полученное значение существенно меньше, чем результат решения

континуальной задачи Кирша для круглой поры (в последнем случае коэффициент концентрации равен 3). Для других форм пор отличия еще существеннее.



Рис. 1.6: Коэффициент концентрации деформаций при одноосном нагружении: (а) в горизонтальном направлении ( $\sigma_{0xx} = 0$ ,  $\sigma_{0yy} = \sigma_0$ ) и (b) в вертикальном направлении ( $\sigma_{0xx} = \sigma_0$ ,  $\sigma_{0yy} = 0$ ). Связи, в которых достигается максимальная деформация, зачеркнуты.

Рассмотрим теперь одноосное напряженное состояние в направлении *x*:

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon, \quad \varepsilon_{yy} = -\nu_0 \varepsilon \quad \Rightarrow \quad \varepsilon_u = \varepsilon_v = \frac{2}{3}\varepsilon, \qquad \varepsilon_w = -\frac{1}{3}\varepsilon.$$
 (1.42)

Вычисляя коэффициент концентрации деформаций на основе поля перемещений (1.32), (1.33), получим:

$$k_x \approx 1.449. \tag{1.43}$$

Как и ранее, полученное значение существенно ниже, чем аналогичный результат континуальной теории.

# 1.7 Заключение к главе 1

Развит подход, позволяющий в линейном приближении описывать влияние вакансий на упругие и прочностные свойства кристаллов. Получено точное аналитическое решение задачи о деформировании двумерной треугольной кристаллической решетки с двояко-периодической системой вакансий. Показано, что в отличие от соответствующего решения задачи линейной теории упругости, при объемном деформировании поле перемещений не обладает центральной симметрией и немонотонно убывает с увеличением расстояния от центра вакансии. Полученное поле перемещений использовалось для вычисления эффективных упругих свойств кристалла с вакансиями и коэффициентов концентрации деформаций вблизи вакансий. Показано, что влияние вакансий на упругие свойства может быть описано в рамках линейной теории упругости. Для этого решетку с вакансиями необходимо заменить пластиной с вырезами. Получены коэффициенты формы вырезов, определить их геометрию однозначно не удается.

Определены коэффициенты концентрации деформаций при объемном и одноосном деформировании решетки с одиночной вакансией. Показано, что данные коэффициенты существенно ниже, чем аналогичные значения в задачах линейной теории упругости (даже в случае кругового отверстия). Следовательно, концентрация деформаций вблизи вакансий не может быть описана в рамках классической линейной теории упругости. Для аппроксимации поведения дискретного решения вблизи вакансии более перспективным представляется использование нелокальных теорий упругости, развиваемых, например, в работах [142, 143, 144]. Сравнение дискретного и континуального решения также может позволить определить масштабные параметры, используемые в нелокальных теориях. Однако подобные исследования выходят за рамки данной работы.

Результаты данной главы опубликованы в работах [114, 198].

# Глава 2

# Переходные процессы в твердых телах с кристаллической структурой

# 2.1 Обзор литературы по переходным процессам в деформируемых твердых телах

Одной из актуальных задач механики деформируемого твердого тела является решение задач термомеханики в условиях, когда материал находится в сильно неравновесном состоянии. В системах, находящихся в тепловом равновесии, кинетическая энергия обычно равно распределена по степеням свободы. Данный факт следует из теоремы о равном распределении [77, 219]. Данная теорема позволяет описывать тепловое состояние системы 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 [21, 63, 72, 73, 76, 132]. Поэтому во многих работах вводится несколько температур [21, 63, 234, 85, 132]. В частности, известно, что температуры решетки и электронной подсистемы в твердых телах, подверженных лазерному воздействию, могут отличаться (см. например, обзорную статью [132]). Несколько температур также обнаруживается при молекулярнодинамическом моделировании ударных волн. В работах [72, 73, 76, 203] показано, что кинетические энергии, соответствующие движениям атомов вдоль и поперек направления распространения ударной волны, вблизи ее фронта могут отличаться почти в 2 раза. В работах [89, 90] рассматривалось распространение тепла в двухатомной одномерной гармонической цепочке, помещенной между двумя тепловыми резервуарами с различными температурами. Было показано, что температуры подрешеток в неравновесном стационарном состоянии отличаются. Аналогичный эффект наблюдается при распространении тепла [117]. В работе [117] показано, что температуры подрешеток в процессе теплопроводности в двухатомной цепочке отличаются, даже если изначально они равны.

В отсутствии внешних воздействий неравновесная система стремится к тепловому равновесию. Переход к тепловому равновесию сопровождается несколькими механическими процессами. Функция распределения скоростей стремится к Гауссовой [34, 70, 95, 128, 188]. Полная энергия перераспределяется между кинетической и потенциальной [2, 6, 95, 240, 246, 187]. Кинетическая энергия перераспределяется между степенями свободы [246]. Энергия перераспределяется между собственными формами системы [170]. Данные процессы, за исключением последнего, происходят как в линейных, так и в нелинейных системах [2, 34, 95, 240, 246, 128, 188]. В гармонических кристаллах энергии собственных форм не меняются. Однако поле кинетической температуры в бесконечных гармонических кристаллах стремится стать пространственно однородным и постоянным во времени [70, 188, 109]. Поэтому понятие теплового равновесия широко применяется к гармоническим кристаллам [18, 33, 34, 35, 82, 128, 188, 201].

Переход к тепловому равновесию рассматривается во многих работах [18, 33, 34, 35, 70, 82, 95, 240, 245, 246, 109, 128, 131, 150, 188]. Исследуются такие аспекты данного процесса как существование равновесного состояния [128], эргодичность [201], стремление функции распределения к нормальному [18, 34, 35, 95], эволюция энтропии [81, 82, 184] и другие. В настоящей главе рассматривается поведение основной экспериментально наблюдаемой величины — кинетической температуры (температур), пропорциональной кинетической энергии хаотического движения частиц.

В литературе представлено два различных подхода к описанию поведения статистических характеристик в гармонических кристаллах. Первый подход использует точное решение уравнений динамики решетки [230, 70, 95, 82, 131]. При известном точном решении кинетическая энергия вычисляется как математическое ожидание кинетической энергии. В частности, в пионерской работе Клейна и Пригожина [95] рассматривался переход к тепловому равновесию в бесконечной гармонической цепочке со случайными начальными условиями. С использованием точного решения, полученного Шредингером [182], было показано, что кинетическая и потенциальная энергии цепочки осциллируют во времени и стремятся к равным равновесным значениям [95]. В рамках второго подхода в качестве основных переменных используются ковариации скоростей и ковариации перемещений частиц<sup>1</sup>. В случае гармонического кристалла для ковариаций удается получить замкнутую систему уравнений в стационарном [89, 136, 173] и нестационарном [57, 240, 245, 246, 109, 137] случаях. Решение данной системы описывает, в частности, изменение кинетической температуры во времени. В работах [240, 245, 246, 109] данная идея использована для описания перехода к равновесию в кристаллах с простой (моноатомной) решеткой<sup>2</sup>. В частности, рассматривались одномерные цепочки [6, 240] и двумерные треугольная и квадратная решетки [245, 246, 109]. Однако выражения для кинетической температуры при переходе к равновесию были получены только для нескольких простых решеток. В настоящей главе получается общая формула

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Ковариацией двух центрированных случайных величин называется математическое ожидание их произведения.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Решетка называется простой, если она совпадает с собой при перемещении на вектор, соединяющий две любые частицы.

для температуры, верная для широкого класса решеток.

Глава организована следующим образом. В параграфе 2.2 приводится постановка и решение задачи о переходе к равновесию в простых скалярных решетках (решетках, в которых каждая частица имеет только одну степень свободы). Задача решается для широкого класса линейных решеток с взаимодействием произвольного числа соседей. Решение строится двумя способами: на основе точного решения уравнений динамики решетки и на основе ковариационного подхода. В обоих случаях удается получить точные формулы, описывающие поведение кинетической энергии. В качестве примера рассматриваются одномерная цепочка, а также квадратная и треугольные решетки, совершающие поперечные колебания. В параграфе 2.3 проводится обобщение полученных результатов на случай сложных решеток с элементарной ячейкой, содержащей произвольное число частиц с произвольным числом степеней свободы. В качестве примера рассматриваются цепочка с чередующимися массами, треугольная решетка и решетка графена. Также исследуется влияние малой нелинейности на рассматриваемые переходные процессы. Основные результаты, полученные в данной главе, опубликованы в работах [109, 245, 246, 115, 9].

# 2.2 Переходные процессы в упругих телах со скалярной кристаллической решеткой

# 2.2.1 Уравнения движения и начальные условия

В рамках настоящего параграфа в качестве модели деформируемого твердого тела используется решетка простой структуры в пространстве размерности d = 1, 2, каждая частица которой имеет одну степень свободы. В таком случае перемещение частицы задается скалярной функцией  $u(\mathbf{x})$ , где  $\mathbf{x}$  — радиусвектор частицы в недеформированном состоянии. Такие решетки в литературе часто называются "скалярными" [150, 67, 179, 161, 155]. Каждая частица взаимодействует с соседями, нумеруемыми индексом *α*. Векторы **a**<sub>*α*</sub>, соединяющие частицу с ее соседями, удовлетворяют соотношению:

$$\mathbf{a}_{\alpha} = -\mathbf{a}_{-\alpha}.\tag{2.1}$$

При этом автоматически выполняется  $\mathbf{a}_0 = 0$ .

Рассматриваются только линейные решетки, в которых сила, действующая на каждую частицу, представляется в виде линейной комбинации перемещений всех частиц. Поэтому уравнение движения может быть записано в виде

$$\ddot{u}(\mathbf{x}) = Du(\mathbf{x}), \qquad Du(\mathbf{x}) = \omega_*^2 \sum_{\alpha} b_{\alpha} u(\mathbf{x} + \mathbf{a}_{\alpha}), \quad b_{\alpha} = b_{-\alpha}, \quad (2.2)$$

где  $\omega_*$  — характерная частота (см. например формулы (2.3), (2.5)); D — линейный разностный оператор. С математической точки зрения формула (2.2) — дифференциально-разностное уравнение или бесконечное множество связанных обыкновенных дифференциальных уравнений.

Уравнения (2.2) описывают поведение целого класса одномерных и двумерных решеток. Например, простейшей моделью, описываемой уравнением (2.2), является одномерная цепочка с взаимодействиями ближайших соседей. В таком случае

$$Du(\mathbf{x}) = \omega_*^2 \Big( u(\mathbf{x} + \mathbf{a}_1) - 2u(\mathbf{x}) + u(\mathbf{x} + \mathbf{a}_{-1}) \Big) \quad \Rightarrow$$
  
$$\Rightarrow \quad \omega_* = \sqrt{\frac{C}{M}}, \qquad \mathbf{a}_{\pm 1} = \pm a\mathbf{i}, \qquad b_{\pm 1} = 1, \quad b_0 = -2,$$
  
$$(2.3)$$

где  $\mathbf{i}$  — единичный вектор, направленный вдоль цепочки; a — равновесное расстояние между частицами; C — жесткость связи; M — масса частиц. Отметим, что уравнение (2.3) при подходящем выборе  $\omega_*$  также описывает линеаризованные поперечные колебания растянутой цепочки с парными взаимодействиями ближайших соседей. В данном случае

$$Du(\mathbf{x}) = -\omega_*^2 \Big( u(\mathbf{x} + \mathbf{a}_2) - 4u(\mathbf{x} + \mathbf{a}_1) + 6u(\mathbf{x}) - 4u(\mathbf{x} + \mathbf{a}_{-1}) + u(\mathbf{x} + \mathbf{a}_{-2}) \Big)$$
  

$$\Rightarrow \quad \omega_* = \sqrt{\frac{C_a}{Ma^2}}, \quad \mathbf{a}_{\pm 1} = \pm a\mathbf{i}, \quad \mathbf{a}_{\pm 2} = \pm 2a\mathbf{i}, \quad b_0 = -6, \quad b_{\pm 1} = 4, \quad b_{\pm 2} = -1, \quad (2.4)$$

где  $C_a$  — жесткость угловой пружинки. Данная модель может использоваться, например, для описания тепловых процессов в карбине, нанопроволоках или алмазных нанонитях.

Простейшая двумерная модель, описываемая уравнением (2.2), — растянутая квадратная решетка с взаимодействиями ближайших соседей, совершающая поперечные колебания. В таком случае

$$Du(\mathbf{x}) = \omega_*^2 \Big( u(\mathbf{x} + \mathbf{a}_1) + u(\mathbf{x} + \mathbf{a}_2) - 4u(\mathbf{x}) + u(\mathbf{x} + \mathbf{a}_{-1}) + u(\mathbf{x} + \mathbf{a}_{-2}) \Big) \quad \Rightarrow \\ \Rightarrow \quad \omega_* = \sqrt{\frac{F}{Ma}}, \quad \mathbf{a}_{\pm 1} = \pm a\mathbf{i}, \quad \mathbf{a}_{\pm 2} = \pm a\mathbf{j}, \quad b_{\pm 1} = b_{\pm 2} = 1, \quad b_0 = -4,$$
(2.5)

где **i**, **j** — ортогональные единичные векторы; *F* — величина силы натяжения в равновесии. Данная решетка подробно рассматривается в параграфе 3.2.5.2. Двумерные решетки могут рассматриваться как простейшие модели поперечных колебаний двумерных материалов, таких как графен, дисульфид молибдена, нитрид бора и др.

В общем случае правильный подбор параметров  $\mathbf{a}_{\alpha}$  и  $b_{\alpha}$  в уравнении (2.2) позволяет описывать линеаризованные колебания одномерных и двумерных скалярных решеток с парными и многочастичными взаимодействиями произвольного числа соседей. Уравнение (2.2) также описывает некоторые системы с моментными взаимодействиями [162], например, цепочку из твердых тел, соединенных упругими связями и фиксированными трансляционными степенями свободы [235]. Также можно рассматривать поперечные колебания двумерных решеток с моментными взаимодействиями при условии, что вращательные степени свободы зафиксированы.

Рассматриваются следующие стохастические начальные условия, типичные для молекулярно-динамического моделирования:

$$u(\mathbf{x}) = 0, \qquad v(\mathbf{x}) = v_0(\mathbf{x}), \qquad (2.6)$$

где  $v = \dot{u}$ ; начальные скорости  $v_0(\mathbf{x})$  — некореллированные случайные величины с нулевым математическим ожиданием. Начальные условия (2.6) соответствуют некоторому начальному распределению кинетической энергии в решетке.

Отметим, что в приведенном ниже выводе не используются предположения о поведении функции распределения для скоростей. Поведение функции распределения и ее стремление к распределению Гаусса обсуждается, например, в работах [34, 35].

### 2.2.2 Дисперсионное соотношение

Построим дисперсионное соотношение для скалярных решеток, описываемых уравнением движения (2.2). Будем искать решение в виде  $u = Ae^{i(\omega t + \mathbf{k} \cdot \mathbf{x})}$ . Подстановка данного решения в уравнения (2.2) дает:

$$\omega^{2}(\mathbf{k}) = -\omega_{*}^{2} \left( b_{0} + 2\sum_{\alpha>0} b_{\alpha} \cos\left(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_{\alpha}\right) \right), \qquad \mathbf{k} = \frac{1}{a} \sum_{j=1}^{d} p_{j} \tilde{\mathbf{e}}_{j}. \tag{2.7}$$

Отметим два важных свойства дисперсионного соотношения (2.7). Первое свойство — симметрия относительно замены **k** на **-k**:

$$\omega(-\mathbf{k})^2 = \omega(\mathbf{k})^2. \tag{2.8}$$

Второе свойство — периодичность. Функция  $\omega^2(p_1, p_2, ..., p_d)$  является  $2\pi$ -периодической:

$$\omega^2(p_1, p_2, ..., p_d) = \omega^2(p_1 + 2C_1\pi, p_2 + 2C_2\pi, ..., p_d + 2C_d\pi), \qquad (2.9)$$

где  $C_i$  — целые числа.

### 2.2.3 О распределении энергии по собственным формам

# 2.2.3.1 Точное решение уравнений движения с использованием дискретного преобразования Фурье

Получим точное решение уравнений движения (2.2) со следующими начальными условиями общего вида:

$$u(\mathbf{x}) = u_0(\mathbf{x}), \qquad v(\mathbf{x}) = v_0(\mathbf{x}).$$
 (2.10)

Для этого воспользуемся дискретным преобразованием Фурье. Основным свойством преобразования Фурье, необходимым для решения уравнений типа (2.2), является свойство сдвига:

$$\Phi\left(\kappa(\mathbf{z} + \mathbf{a}_{\alpha})\right) = \Phi\left(\kappa(\mathbf{z})\right) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_{\alpha}}.$$
(2.11)

С использованием данного тождества нетрудно показать, что выполняются следующие соотношения

$$\Phi(D\kappa) = \hat{D}\hat{\kappa}, \quad \Phi(D^2\kappa) = \hat{D}\Phi(D\kappa) = \hat{D}^2\hat{\kappa}, \quad \hat{D} = \omega_*^2 \sum_{\alpha} b_{\alpha} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_{\alpha}}.$$
 (2.12)

Применяя дискретное преобразование Фурье к уравнению (2.2), получим:

$$\ddot{\hat{u}}(\mathbf{k}) = -\omega(\mathbf{k})^2 \hat{u}(\mathbf{k}), \qquad \omega^2 = -\hat{D}.$$
(2.13)

Видно, что дискретное преобразование Фурье позволяет перейти от системы связанных обыкновенных дифференциальных уравнений для перемещений (2.2) к системе независимых уравнений (2.13) для Фурье-образов перемещений.

Применим дискретное преобразование Фурье к начальным условиям:

$$\hat{u}(\mathbf{k}) = \Phi(u_0(\mathbf{x})), \qquad \hat{v}(\mathbf{k}) = \hat{v}_0 = \Phi(v_0(\mathbf{x})).$$
 (2.14)

Решая уравнения (2.13) с начальными условиями (2.14), получим:

$$\hat{u} = \hat{u}_0 \cos\left(\omega t\right) + \frac{\hat{v}_0}{\omega} \sin\left(\omega t\right), \qquad \hat{v} = \hat{v}_0 \cos\left(\omega t\right) - \omega \hat{u}_0 \sin\left(\omega t\right). \tag{2.15}$$

Применяя обратное преобразование Фурье:

$$u = \Phi^{-1} \left( \hat{u}_0 \cos\left(\omega(\mathbf{k})t\right) + \frac{\hat{v}_0}{\omega(\mathbf{k})} \sin\left(\omega(\mathbf{k})t\right) \right),$$
  

$$v = \Phi^{-1} \left( \hat{v}_0 \cos\left(\omega(\mathbf{k})t\right) - \omega \hat{u}_0 \sin\left(\omega(\mathbf{k})t\right) \right).$$
(2.16)

Формула (2.16) дает решение уравнений движения (2.2) с начальными условиями (2.10).

Таким образом, уравнение (2.2) с начальными условиями (2.10) может быть решено аналитически. Получающиеся в результате решения скорости и перемещения частиц (2.16) являются случайными величинами. Далее точное решение уравнений динамики (2.16) используется при вычислении кинетической энергии системы.

# 2.2.3.2 Точное решение уравнений движения с использованием разложения по собственным формам

Будем искать решение уравнения (2.2) при периодических граничных условиях в виде колебания на собственной частоте  $\omega$ :

$$u(\mathbf{x}) = A(\mathbf{x})e^{\mathbf{i}\omega t}.$$
(2.17)

Подстановка формулы (2.17) в уравнение (2.2) дает:

$$\omega_*^2 \sum_{\alpha} b_{\alpha} A(\mathbf{x} + \mathbf{a}_{\alpha}) + \omega^2 A(\mathbf{x}) = 0.$$
(2.18)

Периодические граничные условия для перемещений имеют вид:

$$u(\mathbf{x}) = u\left(\mathbf{x} + \sum_{j=1}^{d} C_j n a_j \mathbf{e}_j\right),$$
(2.19)

где N — число частиц вдоль каждой стороны ячейки периодичности,  $C_j$  — произвольные целые числа,  $a_j \mathbf{e}_j$  — базисные векторы решетки.

Решение уравнения (2.18) ищем в виде:

$$A(\mathbf{x}) = C_1 \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) + C_2 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}).$$
(2.20)

Данное решение удовлетворяет периодическим граничным условиям (2.19) для любых  $C_1, C_2$  в случае, если волновой вектор выбирается в соответствии с формулой (2.7). Подставляя решение (2.20) в уравнение движения (2.2), умножая обе части на sin( $\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}$ ), cos( $\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}$ ) и суммируя по  $\mathbf{x}$ , получим:

$$C_{1}\left(\omega^{2} + \sum_{\alpha} b_{\alpha} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_{\alpha})\right) - C_{2} \sum_{\alpha} b_{\alpha} \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_{\alpha}) = 0,$$

$$C_{1} \sum_{\alpha} b_{\alpha} \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_{\alpha}) - C_{2} \left(\omega^{2} + \sum_{\alpha} b_{\alpha} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_{\alpha})\right) = 0.$$
(2.21)

Проводя следующие преобразования

$$\sum_{\alpha} b_{\alpha} \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_{\alpha}) = \sum_{\alpha} b_{-\alpha} \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_{-\alpha}) = -\sum_{\alpha} b_{\alpha} \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_{\alpha}) = 0, \qquad (2.22)$$

легко видеть, что система уравнений (2.21) имеет нетривиальное решение только при выполнении условия:

$$\omega^2(\mathbf{k}) = -\sum_{\alpha} b_{\alpha} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_{\alpha}).$$
(2.23)

Данная формула дает собственные частоты скалярной решетки.

Запишем общее решение уравнений динамики в виде разложения по всем собственным формам:

$$u(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}} \left( (C_1 \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) + C_2 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x})) e^{i\omega t} + (B_1 \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) + B_2 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x})) e^{-i\omega t} \right) = \sum_{\mathbf{k}} \left( (C_1 e^{i\omega t} + B_1 e^{-i\omega t}) \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) + (C_2 e^{i\omega t} + B_2 e^{-i\omega t}) \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \right).$$
(2.24)

Здесь величины  $C_1, C_2, B_1, B_2$  являются функциями волнового вектора. Выразим их через начальные условия. В начальный момент времени перемещения и скорости частиц равны:

$$u_0(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}} \left( (C_1 + B_1) \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) + (C_2 + B_2) \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \right),$$
  

$$v_0(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}} i\omega(\mathbf{k}) \left( (C_1 - B_1) \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) + (C_2 - B_2) \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \right).$$
(2.25)

Формулы (2.25) представляют собой разложение функций  $u_0, v_0$  по синусам и косинусам. Умножая обе части на  $\sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x})$  и  $\cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x})$  и суммируя по  $\mathbf{x}$ , получим

систему уравнений для  $C_1, C_2, B_1, B_2$ :

$$C_{1} + B_{1} = \frac{1}{n^{d}} \hat{u}_{0}^{s}, \qquad C_{2} + B_{2} = \frac{1}{n^{d}} \hat{u}_{0}^{c},$$

$$C_{1} - B_{1} = \frac{1}{i\omega(\mathbf{k})n^{d}} \hat{v}_{0}^{s}, \qquad C_{2} - B_{2} = \frac{1}{i\omega(\mathbf{k})n^{d}} \hat{v}_{0}^{c}, \qquad (2.26)$$

$$\hat{u}_{0}^{s} = \sum_{\mathbf{x}} u_{0}(\mathbf{x}) \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}), \qquad \hat{u}_{0}^{c} = \sum_{\mathbf{x}} u_{0}(\mathbf{x}) \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}).$$

Решая систему уравнений (2.26), получим:

$$C_{1} = \frac{1}{2n^{d}} \left( \hat{u}_{0}^{s} + \frac{\hat{v}_{0}^{s}}{i\omega} \right), \qquad C_{2} = \frac{1}{2n^{d}} \left( \hat{u}_{0}^{c} + \frac{\hat{v}_{0}^{c}}{i\omega} \right), B_{1} = \frac{1}{2n^{d}} \left( \hat{u}_{0}^{s} - \frac{\hat{v}_{0}^{s}}{i\omega} \right), \qquad B_{2} = \frac{1}{2n^{d}} \left( \hat{u}_{0}^{c} - \frac{\hat{v}_{0}^{c}}{i\omega} \right).$$
(2.27)

Подстановка получившихся выражений для констант в решение (2.24) дает:

$$u(\mathbf{x}) = \frac{1}{n^d} \sum_{\mathbf{k}} \left[ \left( \hat{u}_0^s \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) + \hat{u}_0^c \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \right) \cos(\omega t) + \frac{1}{\omega} \left( \hat{v}_0^s \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) + \hat{v}_0^c \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \right) \sin(\omega t) \right].$$
(2.28)

Видно, что решение представляется в виде разложения по собственным формам.

Покажем, что решение (2.28) в точности совпадает с решением (2.16), полученным с использованием дискретного преобразования Фурье. Для этого воспользуемся соотношениями:

$$\hat{u}_0 = \hat{u}_0^c - i\hat{u}_0^s, \qquad \hat{v}_0 = \hat{v}_0^c - i\hat{v}_0^s, \qquad e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} = \cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}) + i\sin(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}).$$
 (2.29)

В силу вещественности перемещений частиц выполняется соотношение:

$$u(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \Big( u(\mathbf{x}) + u(\mathbf{x})^* \Big).$$
(2.30)

Пользуясь данным соотношением, можно показать, что подстановка формул (2.29), (2.30) в (2.16) дает (2.28).

Таким образом, дискретное преобразование Фурье и разложение по собственным формам приводят к одному и тому же результату. При этом решение на основе дискретного преобразования Фурье получается с наименьшими "трудозатратами". С другой стороны, наиболее ясный физический смысл имеет представление решения через разложение по вещественным собственным формам.

#### 2.2.3.3 Распределение энергии по собственными формами

Рассмотрим теперь вопрос о распределении энергии по собственным формам. Ограничимся рассмотрением случая, когда начальные перемещения частиц равны нулю. Тогда решение (2.28) записывается в виде:

$$u(\mathbf{x}) = \frac{1}{n^d} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\omega(\mathbf{k})} \left( \hat{v}_0^s \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) + \hat{v}_0^c \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \right) \sin(\omega t).$$
(2.31)

Видно, что решение представляется в виде суммы собственных форм. Вычислим скорости частиц при движении по собственной форме с волновым вектором **k**:

$$\nu(\mathbf{x}, \mathbf{k}) = \frac{1}{n^d} \left( \hat{v}_0^s \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) + \hat{v}_0^c \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \right) \cos(\omega t).$$
(2.32)

При рассматриваемых начальных условиях полная энергия собственной формы равна ее кинетической энергии в начальный момент времени. Проведем следующие преобразования:

$$\nu_0(\mathbf{x}, \mathbf{k}) = \frac{1}{n^d} \left( \hat{v}_0^s \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) + \hat{v}_0^c \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \right) = \frac{1}{n^d} \sum_{\mathbf{y}} v_0(\mathbf{y}) \cos\left(\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y})\right).$$
(2.33)

Тогда полная энергия собственной формы выражается формулой:

$$E(\mathbf{k}) = \frac{M}{2} \sum_{\mathbf{x}} \nu_0(\mathbf{x}, \mathbf{k})^2 = \frac{M}{2n^{2d}} \sum_{\mathbf{x}} \left( \sum_{\mathbf{y}} v_0(\mathbf{y}) \cos\left(\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y})\right) \right)^2.$$
(2.34)

В силу случайности начальных условий энергии собственных форм тоже случайны. Поэтому далее нас будет интересовать не сами энергии, а их математические ожидания. Рассмотрим отдельно математическое ожидание следующего выражения:

$$\left\langle \left( \sum_{\mathbf{y}} v_0(\mathbf{y}) \cos\left(\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y})\right) \right)^2 \right\rangle =$$
  
= 
$$\sum_{\mathbf{z}, \mathbf{y}} \left\langle v_0(\mathbf{x}) v_0(\mathbf{y}) \right\rangle \cos\left(\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y})\right) \cos\left(\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{z})\right) =$$
  
= 
$$\left\langle v_0^2 \right\rangle \sum_{\mathbf{y}} \cos^2\left(\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y})\right) = \frac{1}{2} \left\langle v_0^2 \right\rangle \left( n^d + \sum_{\mathbf{y}} \cos\left(2\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y})\right) \right).$$
 (2.35)

Здесь использована статистическая независимость начальных скоростей различных частиц, а также пространственная однородность начального распределения кинетической энергии. Вычисляя математическое ожидание энергии с учетом формулы (2.35), получим:

$$\left\langle E(\mathbf{k})\right\rangle = \frac{M}{4} \left\langle v_0^2 \right\rangle \left( 1 + \frac{1}{n^{2d}} \sum_{\mathbf{x}, \mathbf{y}} \cos\left(2\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y})\right) \right).$$
 (2.36)

Для большинства значений волнового вектора (за исключением, например,  $\mathbf{k} = 0$ ) сумма в скобках равна нулю. Для того чтобы это показать, проведем следующие преобразования:

$$\sum_{\mathbf{x},\mathbf{y}} \cos\left(2\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y})\right) = \frac{1}{2} \left( \sum_{\mathbf{x},\mathbf{y}} e^{2i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y})} + \sum_{\mathbf{x},\mathbf{y}} e^{-2i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y})} \right),$$

$$\sum_{\mathbf{x},\mathbf{y}} e^{2i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y})} = \sum_{\mathbf{x}} e^{2i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \sum_{\mathbf{y}} e^{-2i\mathbf{k} \cdot \mathbf{y}} = |\sum_{\mathbf{x}} e^{2i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}|^{2}.$$
(2.37)

Рассмотрим отдельно следующее соотношение:

$$\sum_{\mathbf{x}} e^{2i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} = \sum_{z_1=0}^{n-1} \dots \sum_{z_d=0}^{n-1} e^{i\frac{4\pi}{n}z_1k_1} \dots e^{i\frac{4\pi}{n}z_dk_d}.$$
(2.38)

Здесь  $z_j = 0, ..., n - 1, k_j = 0, ..., n - 1$ . Тогда данная сумма отлична от нуля при  $\mathbf{k} = 0$  и  $k_1 = ... = k_d = \frac{n}{2}$  (для четных n). Сумма косинусов в формуле (2.37) отлична от нуля для тех же значений  $\mathbf{k}$ . В результате математическое ожидание энергии для почти всех  $\mathbf{k}$  принимает вид:

$$\left\langle E(\mathbf{k}) \right\rangle = \frac{1}{4} M \left\langle v_0^2 \right\rangle.$$
 (2.39)

Таким образом, показано, что при задании случайных некоррелированных начальных скоростей частиц математические ожидания энергий всех нормальных мод (кроме  $\mathbf{k} = 0$  и  $k_1 = ... = k_d = \frac{n}{2}$ ) одинаковы.

## 2.2.4 Уравнение динамики ковариаций скоростей

Далее в рамках данного параграфа исследуется поведение математического ожидания кинетической энергии кристалла со случайными начальными скоростями. Данная величина совершает затухающие высокочастотные колебания, связанные с переходом половины кинетической энергии в потенциальную. Для описания этих колебаний в настоящем параграфе вводятся ковариации скоростей и перемещений частиц. Для ковариаций удается получить уравнение динамики, начальные условия для которого являются детерминированными. Решение уравнения для ковариаций описывает, в частности, поведение кинетической энергии системы.

Рассмотрим бесконечное множество реализаций одного и того же кристалла, отличающихся случайными начальными условиями. Введем ковариации скоро-

стей частиц с радиус-векторами  ${\bf x}$  и  ${\bf y}$  формулой

$$\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \left\langle v(\mathbf{x})v(\mathbf{y}) \right\rangle. \tag{2.40}$$

Здесь и далее угловыми скобками  $\langle ... \rangle$  обозначается математическое ожидание. В расчетах математическое ожидание заменяется на среднее по реализациям с различными начальными условиями.

Ковариация скоростей связана с кинетической энергией *T* следующим соотношением:

$$T(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}M\left\langle v(\mathbf{x})^2 \right\rangle = \frac{1}{2}M\kappa|_{\mathbf{x}=\mathbf{y}}.$$
(2.41)

Получим уравнение для ковариаций скоростей. Заметим, что скорости частиц также удовлетворяют уравнению (2.2):

$$\ddot{v}\left(\mathbf{x}\right) = Dv\left(\mathbf{x}\right).\tag{2.42}$$

Введем вспомогательную величину — ковариацию ускорений

$$\zeta = \left\langle \dot{v}(\mathbf{x})\dot{v}(\mathbf{y})\right\rangle. \tag{2.43}$$

Дифференцирование ковариаций скоростей  $\kappa$  и ковариаций ускорений  $\zeta$  по времени с учетом уравнений движения (2.2), (2.42) дает:

$$\ddot{\kappa} = (D_x + D_y)\kappa + 2\zeta, \quad \ddot{\zeta} = (D_x + D_y)\zeta + 2D_xD_y\kappa,$$

$$D_x\kappa = \omega_*^2 \sum_{\alpha} b_{\alpha}\kappa(\mathbf{x} + \mathbf{a}_{\alpha}, \mathbf{y}), \quad D_y\kappa = \omega_*^2 \sum_{\alpha} b_{\alpha}\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y} + \mathbf{a}_{\alpha}).$$
(2.44)

Исключая ковариации ускорений  $\zeta$  из системы (2.44), получим:

$$\ddot{\kappa} - 2(D_x + D_y)\ddot{\kappa} + (D_x - D_y)^2\kappa = 0.$$
 (2.45)

Уравнение (2.45) *в точности* описывает поведение поля кинетической энергии в любой гармонической скалярной решетке.

Рассмотрим еще один вывод уравнения (2.45) для ковариаций скоростей [57]. Введем ковариации скоростей и перемещений:

$$\xi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \left\langle u(\mathbf{x})u(\mathbf{y}) \right\rangle, \quad \nu(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \left\langle u(\mathbf{x})v(\mathbf{y}) \right\rangle, \quad \nu(\mathbf{x}, \mathbf{y})^* = \left\langle v(\mathbf{x})u(\mathbf{y}) \right\rangle.$$
(2.46)

Дифференцирование ковариаций по времени с учетом уравнений движения дает:

$$\dot{\xi} = \nu + \nu^*, \qquad \dot{\nu} = D_y \xi + \kappa, \qquad \dot{\kappa} = D_x \nu + D_y \nu^*.$$
 (2.47)

Повторное дифференцирование дает:

$$\ddot{\xi} = D_x \xi + D_y \xi + 2\kappa, \qquad \ddot{\kappa} = D_x \kappa + D_y \kappa + 2D_x D_y \xi.$$
(2.48)

Первое из данных уравнений позволяет выразить  $\kappa$  через  $\xi$ :

$$\kappa = \frac{1}{2} \left( \ddot{\xi} - D_x \xi - D_y \xi \right). \tag{2.49}$$

Следовательно, ковариации скоростей и перемещений связаны дифференциально-разностным оператором, стоящим в правой части (2.49). Применяя данный оператор к первому из уравнений (2.48), получим уравнение (2.45) для  $\kappa$ . Отметим, что ковариации перемещений  $\xi$  также удовлетворяют уравнению (2.45).

Начальные условия к уравнению (2.45), соответствующие начальным условиям для частиц (2.6), имеют вид:

$$\kappa = \frac{2}{M} T_0(\mathbf{x}) \delta_D(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad \dot{\kappa} = 0, \quad \ddot{\kappa} = \frac{2}{M} \left( D_x + D_y \right) \left( T_0(\mathbf{x}) \delta_D(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \right), \quad \ddot{\kappa} = 0,$$
  
$$T_0(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} M \left\langle v_0(\mathbf{x})^2 \right\rangle, \quad (2.50)$$

где  $T_0(\mathbf{x})$  — пространственное распределение начальной кинетической энергии; функция  $\delta_D(\mathbf{x} - \mathbf{y})$  равна единице при  $\mathbf{x} = \mathbf{y}$  и нулю при  $\mathbf{x} \neq \mathbf{y}$ .

Таким образом, получено точное детерминированное уравнение (2.45) для стохастической задачи. Точное решение данного уравнения в случае однородного начального распределения энергии получено в следующем параграфе.

Аналогичный метод вывода уравнений для ковариаций может также применяться для описания тепловых процессов в цепочках с консервативным шумом [137]. Однако для получения замкнутой системы уравнений необходимо дополнительно рассматривать поведение ковариаций перемещений и смешанных ковариаций.

#### 2.2.5 Колебания энергий

Рассмотрим однородное начальное распределение энергии в решетке. Введем переменные

$$(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \to (\mathbf{r}, \, \mathbf{x} - \mathbf{y}), \qquad \mathbf{r} = \frac{\mathbf{x} + \mathbf{y}}{2}.$$
 (2.51)

Тогда ковариация скоростей представляется в виде  $\kappa(\mathbf{r}, \mathbf{x} - \mathbf{y})$ . При однородных начальных условиях ковариации не зависят от пространственной координаты **r**. Тогда для операторов  $D_x, D_y$  выполняются соотношения:

$$D_x = D_y = D,$$
  $D = \omega_*^2 \sum_{\alpha} b_{\alpha} S_{\alpha},$   $S_{\alpha} \kappa = \kappa (\mathbf{r}, \mathbf{x} - \mathbf{y} + \mathbf{a}_{\alpha}).$  (2.52)

Подстановка формулы (3.171) в (2.45), (2.50) дает уравнение

$$\ddot{\kappa} - 4D\ddot{\kappa} = 0 \tag{2.53}$$

с начальными условиями

$$\kappa = \frac{2}{M} T_0 \delta_D(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad \dot{\kappa} = 0, \quad \ddot{\kappa} = \frac{4}{M} T_0 D \delta_D(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad \ddot{\kappa} = 0.$$
(2.54)

Решение начальной задачи (2.53), (2.54) в точности описывает изменение кинетической энергии в решетке.

Решение уравнения (2.53) строится с использованием дискретного преобразования Фурье по вектору **х** – **у**. Для рассматриваемых в настоящем параграфе простых решеток векторы **х** – **у** представляются в виде

$$\mathbf{x} - \mathbf{y} = a \sum_{j=1}^{d} z_j \mathbf{e}_j, \qquad (2.55)$$

где  $\mathbf{e}_j, j = 1, ..., d$  — единичные векторы, сонаправленные с базисными векторами решетки; d — размерность пространства; a — равновесное расстояние;  $z_j$  — целые числа.

Применяя в уравнении (2.53) дискретное преобразование Фурье по  $z_j$ , получим уравнение для образов:

$$\ddot{\hat{\kappa}} + 4\omega^2 \ddot{\hat{\kappa}} = 0. \tag{2.56}$$

Здесь  $\omega = \omega(\mathbf{k})$  — дисперсионное соотношение для решетки (2.7),  $\mathbf{k} = \frac{1}{a} \sum_{j=1}^{d} p_j \tilde{\mathbf{e}}_j$  — волновой вектор,  $\tilde{\mathbf{e}}_j$  — векторы сопряженного базиса. Начальные условия для образов получаются после применения дискретного преобразования Фурье к формуле (2.54):

$$\hat{\kappa} = \frac{2}{M}T_0, \quad \dot{\hat{\kappa}} = 0, \quad \ddot{\hat{\kappa}} = -\frac{4}{M}T_0\omega^2, \quad \ddot{\hat{\kappa}} = 0.$$
(2.57)

Решая уравнение (2.56) с начальными условиями (2.54) и применяя обратное дискретное преобразование Фурье, получим

$$T = \frac{T_0}{2} \left[ 1 + \Phi^{-1} \left( \cos(2\omega t) \right) \right].$$
 (2.58)

Формула (2.58) в точности описывает изменение кинетической энергии. Кинетическая энергия совершает высокочастотные колебания, связанные с переходом

части энергии в потенциальную. Подинтегральное выражение в формуле (2.58) меняет знак и осциллирует с частотой, пропорциональной времени. Следовательно, второе слагаемое в скобках стремится к нулю<sup>3</sup>. Более подробное исследование данного процесса для квадратной решетки, совершающей поперечные колебания, приведено в параграфе 3.2.5.2. Отметим, что формула (2.58) является симметричной по отношению ко времени (замене  $t \rightarrow -t$ ). В то же время описываемый переходный процесс является необратимым (см. параграф 3.2.5.2).

#### 2.2.6 Примеры

# 2.2.6.1 Пример. Одномерная цепочка (взаимодействия ближайших соседей)

Рассмотрим одномерную цепочку с взаимодействием ближайших соседей. Уравнения движения цепочки имеют вид:

$$\ddot{u}(x) = \omega_*^2 \Big( u(x+a) - 2u(x) + u(x-a) \Big).$$
(2.59)

Осцилляции кинетической энергии в такой системе описываются интегралом (2.58). Подставляя параметры (2.3) в формулу (2.58) и провод интегрирование, получим

$$T = \frac{T_0}{2} \left( 1 + J_0(4\omega_* t) \right), \qquad (2.60)$$

где  $J_0$  — функция Бесселя первого рода. На больших временах данную формулу можно упростить, применяя известную асимптотическую формулу для функции Бесселя. В результате получим:

$$T \approx \frac{T_0}{2} \left( 1 + \frac{1}{\sqrt{2\pi\omega_* t}} \cos\left(4\omega_* t - \frac{\pi}{4}\right) \right).$$
 (2.61)

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>Данное утверждение можно доказать с использованием асимптотических методов, изложенных, например, в монографии [208].

Формула (2.60) показывает, что отклонение энергии от среднего значения стремится к нулю обратно пропорционально корню из времени. Данный факт следует из асимптотики функции Бесселя *J*<sub>0</sub>. Формула (2.60) была впервые получена в работе [240].

#### 2.2.6.2 Пример. Поперечные колебания квадратной решетки

Рассмотрим колебания кинетической энергии в растянутой квадратной решетке, совершающей поперечные колебания. Радиус-векторы частиц в недеформированном состоянии задаются соотношениями:

$$\mathbf{x}_{n,m} = a \left( n \mathbf{i} + m \mathbf{j} \right), \qquad (2.62)$$

где **i**, **j** — ортогональные единичные векторы; *a* — начальное расстояние между ближайшими соседями. Частицы соединены с соседями линейными пружинками. Равновесная длина пружинок меньше *a*, т.е. решетка растянута (в нерастянутой решетке поперечные колебания являются существенно нелинейными). Тогда линеаризованные уравнения поперечных колебания имеют вид:

$$\ddot{u}(\mathbf{x}) = \omega_*^2 \sum_{\alpha = \pm 2; \pm 1} \left( u(\mathbf{x} + \mathbf{a}_\alpha) - u(\mathbf{x}) \right), \qquad \mathbf{a}_{\pm 1} = \pm a\mathbf{i}, \qquad \mathbf{a}_{\pm 2} = \pm a\mathbf{j}, \quad (2.63)$$

где  $u(\mathbf{x})$  — проекция вектора перемещения на нормаль к плоскости решетки. Видно, что уравнение (3.74) является частным случаем уравнения (2.2), где параметры  $\omega_*$ ,  $b_{\alpha}$  определяются формулой (2.5):

$$\omega_* = \sqrt{\frac{F}{Ma}}, \quad b_{\pm 1} = b_{\pm 2} = 1, \quad b_0 = -4,$$
 (2.64)

где *F* — сила натяжения, *M* — масса частицы.

Для программной реализации численного интегрирования уравнений (3.74)

удобно также использовать следующую индексную запись:

$$\ddot{u}_{n,m} = \omega_*^2 \left( u_{n+1,m} + u_{n,m+1} - 4u_{n,m} + u_{n-1,m} + u_{n,m-1} \right), \qquad (2.65)$$

где  $u_{n,m} = u(\mathbf{x}_{n,m}).$ 

Для построения дисперсионного соотношения достаточно подставить конкретные выражения для параметров  $b_{\alpha}$  и векторов  $\mathbf{a}_{\alpha}$  в общую формулу (2.7). В результате подстановки получаем:

$$\omega = 2\omega_* \sqrt{\sin^2 \frac{p_1}{2} + \sin^2 \frac{p_2}{2}}, \quad \mathbf{k} = \frac{1}{a} \left( p_1 \mathbf{i} + p_2 \mathbf{j} \right). \tag{2.66}$$

Дисперсионная поверхность (2.66) показана на рис. 2.1. Видно, что дисперси-



Рис. 2.1: Дисперсионная поверхность  $\omega(p_1, p_2)/\omega_*$  для квадратной решетки, совершающей поперечные колебания.

онное соотношение симметрично относительно замены  $p_1$  на  $p_2$ . Данная симметрия является следствием симметрии решетки. Она позволяет при описании колебаний температуры ограничиться рассмотрением треугольника  $p_2[0; p_1]$ ,  $p_1 \in [0; \pi]$ . Заметим, что в данном треугольнике компоненты групповой скорости  $\frac{\partial \omega}{\partial p_1}$  и  $\frac{\partial \omega}{\partial p_2}$  одновременно обращаются в ноль в двух точках:  $p_1 = \pi, p_2 = 0$ 

и  $p_1 = p_2 = \pi$ . Соответствующие частоты имеют вид:

$$\Omega_1 = 2\omega_*, \qquad \Omega_2 = 2\sqrt{2}\omega_*. \tag{2.67}$$

По-видимому, основные колебания кинетической температуры происходят на данных частотах (удвоенных).

Начальные условия для уравнений движения частиц, соответствующие однородному начальному распределению кинетической энергии  $T_0$ , имеют вид

$$u_{n,m} = 0, \qquad v_{n,m} = v_0, \tag{2.68}$$

где  $v_0$  — случайная величина с дисперсией  $\langle v_0^2 \rangle = 2T_0/M$ . В таком случае начальные кинетическая и потенциальная энергии не равны. Выравнивание энергий приводит к колебаниям кинетической энергии, описываемым формулой (2.58). Подстановка дисперсионного соотношения (2.66) в формулу (2.58) дает:

$$T = \frac{T_0}{2} \left( 1 + \frac{1}{\pi^2} \int_0^{\pi} \int_0^{\pi} \cos\left(4\omega_* t \sqrt{\sin^2 \frac{p_1}{2} + \sin^2 \frac{p_2}{2}}\right) dp_1 dp_2 \right).$$
(2.69)

Для проверки формулы (2.69) проведем сравнение с результатами численного решения уравнений движения (3.74). Для численного интегрирования используется метод центральных разностей с шагом  $0.0025\tau_*, \tau_* = 2\pi/\omega_*$ . В обоих направлениях ставятся периодические граничные условия. Ячейка периодичности содержит 10<sup>6</sup> частиц. В процессе моделирования вычисляется полная кинетическая энергия системы (см. рис. 2.2). При таком количестве частиц осреднение по реализациям не требуется. В частности, точки на графике — результат всего одной реализации. При вычислении температуры по формуле (2.69) интеграл в данной формуле, т.е. фактически рассматривалось дискретное преобразование Фурье для конечной системы, содержащей  $N^2 = 500^2$  ковариаций. Дальнейшее увеличение количества ковариаций влияет на вид графика. Из рисунка 2.2



Рис. 2.2: Осцилляции кинетической энергии в растянутой квадратной решетке. Сплошная линия — аналитическое решение (2.69), ромбы — численное решение уравнений динамики решетки (3.74).

видно, что аналитическое решение (2.69) совпадает с результатами численного решения уравнений динамики решетки (3.74). Стандартная ошибка среднего при определении кинетической энергии порядка размера точек на графике.

Колебания кинетической энергии затухают со временем. Характерное время данного процесса составляет порядка нескольких периодов  $\tau_*$ . Домножая энергию на время, можно показать, что отклонение от стационарного значения стремится к нулю как 1/t. Аналогичные колебания в одномерной цепочке затухают как  $1/\sqrt{t}$ .

#### 2.2.6.3 Пример. Поперечные колебания треугольной решетки

Рассмотрим колебания кинетической энергии в растянутой треугольной решетке, совершающей поперечные колебания. Радиус-векторы частиц в недеформированном состоянии задаются соотношениями:

$$\mathbf{x}_{n,m} = a \left( n \mathbf{e}_1 + m \mathbf{e}_2 \right), \qquad \mathbf{e}_1 = \frac{\sqrt{3}}{2} \mathbf{i} + \frac{1}{2} \mathbf{j}, \qquad \mathbf{e}_2 = -\frac{\sqrt{3}}{2} \mathbf{i} + \frac{1}{2} \mathbf{j}, \qquad (2.70)$$

где **i**, **j** — ортогональные единичные векторы; *a* — начальное расстояние между ближайшими соседями.

Частицы соединены с соседями линейными пружинками. Равновесная длина пружинок меньше *a*, т.е. решетка растянута (в нерастянутой решетке поперечные колебания являются существенно нелинейными). Тогда линеаризованные уравнения поперечных колебания имеют вид:

$$\ddot{u}(\mathbf{x}) = \omega_*^2 \left( u(\mathbf{x} + \mathbf{a}_1) + u(\mathbf{x} + \mathbf{a}_2) + u(\mathbf{x} + \mathbf{a}_3) - 6u(\mathbf{x}) + u(\mathbf{x} + \mathbf{a}_{-1}) + u(\mathbf{x} + \mathbf{a}_{-2}) + u(\mathbf{x} + \mathbf{a}_{-3}) \right).$$
(2.71)

Видно, что уравнение (2.71) является частным случаем уравнения (2.2), где параметры  $\omega_*$ ,  $\mathbf{a}_{\alpha}$ ,  $b_{\alpha}$  определяются формулой:

$$\omega_* = \sqrt{\frac{F}{Ma}}, \qquad b_{\pm 1} = b_{\pm 2} = b_{\pm 3} = 1, \qquad b_0 = -6,$$

$$\mathbf{a}_1 = a\mathbf{e}_1, \qquad \mathbf{a}_2 = a\mathbf{e}_2, \qquad \mathbf{a}_3 = \mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2,$$
(2.72)

где *F* — сила натяжения, *M* — масса частицы. При программной реализации численного интегрирования уравнений движения удобнее пользоваться следующей индексной формой записи:

$$\ddot{u}_{n,m} = \omega_*^2 \left( u_{n+1,m} + u_{n,m+1} + u_{n+1,m+1} - 6u_{n,m} + u_{n-1,m} + u_{n,m-1} + u_{n-1,m-1} \right),$$
(2.73)

где  $u_{n,m} = u(\mathbf{x}_{n,m})$  — проекция вектора перемещения на нормаль к плоскости решетки.

Для построения дисперсионного соотношения достаточно подставить конкретные выражения для параметров  $b_{\alpha}$  и векторов  $\mathbf{a}_{\alpha}$  в общую формулу (2.7). В результате подстановки получаем:

$$\omega = 2\omega_* \sqrt{\sin^2 \frac{p_1}{2} + \sin^2 \frac{p_2}{2} + \sin^2 \frac{p_1 + p_2}{2}}, \quad \mathbf{k} = \frac{1}{a} \left( p_1 \tilde{\mathbf{e}}_1 + p_2 \tilde{\mathbf{e}}_2 \right). \tag{2.74}$$

Дисперсионная поверхность (2.74) показана на рис. 2.3.



Рис. 2.3: Дисперсионная поверхность  $\omega(p_1, p_2)/\omega_*$  для треугольной решетки, совершающей поперечные колебания.

Начальные условия для уравнений движения частиц, соответствующие однородному начальному распределению энергии  $T_0$ , имеют вид

$$u_{n,m} = 0, \qquad v_{n,m} = v_0,$$
 (2.75)

где  $v_0$  — случайная величина с дисперсией  $\langle v_0^2 \rangle = 2T_0/M$ . В таком случае начальные кинетическая и потенциальная энергии не равны. Выравнивание энергий приводит к колебаниям кинетической энергии, описываемым формулой (2.58). Подстановка дисперсионного соотношения (2.3) в формулу (3.46) дает:

$$T = \frac{T_0}{2} \left( 1 + \frac{1}{\pi^2} \int_0^{\pi} \int_0^{\pi} \cos\left(4\omega_* t \sqrt{\sin^2\frac{p_1}{2} + \sin^2\frac{p_2}{2} + \sin^2\frac{p_1 + p_2}{2}}\right) dp_1 dp_2 \right).$$
(2.76)

Для проверки формулы (2.76) проведем сравнение с результатами численного решения уравнений движения (2.73). Для численного интегрирования используется метод центральных разностей с шагом  $0.0025\tau_*, \tau_* = 2\pi/\omega_*$ . В обоих направлениях ставятся периодические граничные условия. Ячейка периодичности содержит 10<sup>6</sup> частиц. В процессе моделирования вычисляется полная кинетическая энергия системы (см. рис. 2.4). При таком количестве частиц осреднение по реализациям не требуется. В частности, точки на графике — результат всего одной реализации. Из рисунка 2.4 видно, что аналитическое решение (2.76) совпа-



Рис. 2.4: Осцилляции кинетической энергии в треугольной решетке, совершающей поперечные колебания. Сплошная линия — аналитическое решение (2.76), ромбы — численное решение уравнений динамики решетки (2.73).

дает с результатами численного решения уравнений динамики решетки (2.73). Колебания кинетической энергии имеют две характерные частоты, близкие по величине. В результате наблюдаются биения.

#### 2.2.7 Результаты параграфа 2.2

В данном параграфе приведено описание переходных процессов в скалярных решетках со случайными начальными скоростями. Уравнения движения записаны в общем виде, позволяющем проводить выкладки для широкого класса систем, к которым относятся, например, одномерные цепочки и двумерные простые решетки, совершающие поперечные колебания. При этом подход позволяет учитывать взаимодействие произвольного числа соседей. Построен общий вид дисперсионного соотношения. Исследованы колебания кинетической энергии. Выведено точное уравнение для ковариаций скоростей с детерминированными начальными условиями, описывающее данный процесс. Получено решение данного уравнения (2.58), описывающее колебания кинетической энергии для всего рассматриваемого класса решеток. Информация о решетке входит в данную формулу через дисперсионное соотношение.

Для примера рассмотрены три конкретных решетки: одномерная цепочка с взаимодействием ближайших соседей, растянутая квадратная решетка, совершающая поперечные колебания и растянутая треугольная решетка, совершаюцая поперечные колебания. Для цепочки полученные результаты воспроизводят результаты работы [240]. Для квадратной решетки построена зависимость кинетической энергии от времени. Показано, что она совершает колебания, связанные с выравниванием кинетической и потенциальной энергий. При этом отклонение кинетической энергии от равновесного значения совершает затухающие колебания. Амплитуда колебаний затухает обратно пропорционально времени. Колебания имеют две основные частоты, соответствующие нулевым значениям групповой скорости. Аналогичные результаты получены для треугольной решетки, совершающей поперечные колебания. Показано, что колебания кинетической энергии также имеют две основных частоты, но в отличие от квадратной решетки, данные частоты близки по величине, что приводит к возникновению биений.

# 2.3 Переходные процессы в упругих телах со сложной кристаллической решеткой

В настоящем параграфе проводится обобщение полученных ранее результатов на случай простых и сложных кристаллических решеток в пространстве произвольной размерности. Рассматривается два переходных процесса: выравнивание кинетической и потенциальной энергий и перераспределение кинетической энергии по степеням свободы.

#### 2.3.1 Матричная запись уравнений движения

В настоящем параграфе уравнения динамики сложной решетки записываются в матричном виде. Для идентификации элементарных ячеек используются радиус-векторы, **x**, их центров. Для аналитических выкладок это удобнее, чем использование индексов, т.к. число индексов зависит от размерности пространства, а радиус-вектор всегда один. Каждая элементарная ячейка имеет Nстепеней свободы  $u_i(\mathbf{x}), i = 1, ..., N$ , соответствующих компонентам векторов перемещений частиц, находящихся в данной ячейке. Компоненты перемещений формируют вектор-столбец:

$$\boldsymbol{u}(\mathbf{x}) = (u_1, u_2, ..., u_N)^{\top},$$
 (2.77)

где *Т* — знак транспонирования.

Запишем уравнения динамики частиц, находящихся в элементарной ячейке с радиус-вектором **x**, в матричном виде:

$$\boldsymbol{M}\dot{\boldsymbol{v}}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{D}_{x}\boldsymbol{u}(\mathbf{x}), \qquad (2.78)$$

где  $\boldsymbol{u}(\mathbf{x}), \, \boldsymbol{v}(\mathbf{x})$  — вектор-столбцы из компонент векторов перемещений и скоростей частиц, находящихся в ячейке с радиус-вектором  $\mathbf{x}; \, \boldsymbol{M}$  — диагональная матрица  $N \times N$ , составленная из масс частиц;  $\boldsymbol{D}_x$  — матричный разностный оператор.

Для нумерации всех ячеек, соседних с ячейкой **x**, будем использовать индекс  $\alpha$ . Векторы, соединяющие центр ячейки **x** и соседней ячейки номер  $\alpha$ , обозначим **a**<sub> $\alpha$ </sub>. При этом как и ранее векторы **a**<sub> $\alpha$ </sub> удовлетворяют тождеству:

$$\mathbf{a}_{\alpha} = -\mathbf{a}_{-\alpha}.\tag{2.79}$$

Данное тождество справедливо, т.к. элементарные ячейки сложной решетки всегда образуют простую решетку.

Как и ранее ограничимся рассмотрением линейных взаимодействий между частицами. При этом сила, действующая на частицы элементарной ячейки **x**, представима в виде линейной комбинации перемещений всех частиц решетки:

$$\boldsymbol{D}_{x}\boldsymbol{u}(\mathbf{x}) = \sum_{\alpha} \boldsymbol{C}_{\alpha}\boldsymbol{u}(\mathbf{x} + \mathbf{a}_{\alpha}), \qquad \boldsymbol{C}_{\alpha} = \boldsymbol{C}_{-\alpha}^{\top}, \qquad (2.80)$$

где  $C_{\alpha}$  — матрица, коэффициенты которой определяют вклад ячейки  $\alpha$  в суммарную силу, действующую на рассматриваемую ячейку. Суммирование ведется по всем соседним элементарным ячейкам  $\alpha$ . Похожая форма используется в работе [150], где также вводится условие  $C_{\alpha} = C_{-\alpha}^{\top}$ . Далее будет показано, что при выполнении данного условия матрица, собственные числа которой дают дисперсионное соотношение, является эрмитовой. Эрмитова матрица — матрица равная себе транспонированной, комплексно сопряженной. Известно, что эрмитовы матрицы имеют вещественные собственные числа. Это является необходимым, но не достаточным условием существования волн в решетке (нужно также, чтобы собственные числа были положительными).

Рассматриваются следующие начальные условия:

$$\boldsymbol{u}(\mathbf{x}) = 0, \quad \boldsymbol{v}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{v}_0(\mathbf{x}),$$
 (2.81)

где  $\boldsymbol{v}_0(\mathbf{x})$  — независимые случайные векторы с нулевым математическим ожиданием. Система уравнений движения (2.78) с начальными условиями (2.81) полностью определяют динамику кристалла в любой момент времени.

### 2.3.2 Дисперсионное соотношение

Распространение волн в решетке определяется ее дисперсионным соотношением. Как будет показано далее, данная величина также играет ключевую роль и при описании переходных процессов в решетках. Построим дисперсионное соотношение для произвольной решетки, описываемой уравнением (2.78).

Рассмотрим уравнения динамики решетки (2.78). Сделаем подстановку  $M^{\frac{1}{2}}u(\mathbf{x}) = Ae^{i(\omega t + \mathbf{k} \cdot \mathbf{x})}$ . Иными словами, будем искать решение в виде гармонической волны с частотой  $\omega$  и волновым вектором **k**. Подставляя в уравнение движения, получим:

$$\left(\sum_{\alpha} \boldsymbol{M}^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{C}_{\alpha} \boldsymbol{M}^{-\frac{1}{2}} e^{\mathrm{i} \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_{\alpha}} + \omega^{2} \boldsymbol{E}\right) \boldsymbol{A} = 0.$$
(2.82)

В результате получаем однородную систему линейных уравнений относительно *А*. Система имеет нетривиальное решение при выполнении условия:

$$\det\left(\sum_{\alpha} \boldsymbol{M}^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{C}_{\alpha} \boldsymbol{M}^{-\frac{1}{2}} e^{\mathbf{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_{\alpha}} + \omega^{2} \boldsymbol{E}\right) = 0.$$
(2.83)

Формула (2.83) — уравнение степени N относительно  $\omega^2$ . Решение данного уравнения дает дисперсионное соотношение  $\omega^2(\mathbf{k})$ . Иными словами, квадраты частот,  $\omega^2$ , являются собственными числами динамической матрицы:

$$\boldsymbol{\Omega} = -\sum_{\alpha} \boldsymbol{M}^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{C}_{\alpha} \boldsymbol{M}^{-\frac{1}{2}} e^{\mathrm{i} \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_{\alpha}}.$$
(2.84)

Покажем, что матрица  $\boldsymbol{\Omega}$  — эрмитова при выполнении введенного выше условия  $\boldsymbol{C}_{\alpha} = \boldsymbol{C}_{-\alpha}^{\top}$ :

$$\boldsymbol{\Omega}^{T*} = -\sum_{\alpha} \boldsymbol{M}^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{C}_{\alpha}^{\top} \boldsymbol{M}^{-\frac{1}{2}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_{\alpha}} = -\sum_{\alpha} \boldsymbol{M}^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{C}_{-\alpha}^{\top} \boldsymbol{M}^{-\frac{1}{2}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{a}_{-\alpha}} = \\ = -\sum_{\alpha} \boldsymbol{M}^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{C}_{\alpha} \boldsymbol{M}^{-\frac{1}{2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_{\alpha}} = \boldsymbol{\Omega},$$

$$(2.85)$$

что и требовалось доказать.

Покажем теперь, что дисперсионное соотношение четно по отношению к волновому вектору. Физически это означает, что волны одной длины, распро-

страняющиеся в противоположных направлениях, имеют одинаковые частоты:

$$\omega^2(-\mathbf{k}) = \omega^2(\mathbf{k}). \tag{2.86}$$

Для доказательства перепишем формулу (2.83):

$$\det \left( \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k}) + \omega^{2}(\mathbf{k})\boldsymbol{E} \right) = \det \left( \sum_{\alpha} \boldsymbol{M}^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{C}_{\alpha}^{\top} \boldsymbol{M}^{-\frac{1}{2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_{\alpha}} + \omega^{2} \boldsymbol{E} \right) =$$

$$= \det \left( \sum_{\alpha} \boldsymbol{M}^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{C}_{-\alpha}^{\top} \boldsymbol{M}^{-\frac{1}{2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_{-\alpha}} + \omega^{2} \boldsymbol{E} \right) =$$

$$= \det \left( \sum_{\alpha} \boldsymbol{M}^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{C}_{\alpha} \boldsymbol{M}^{-\frac{1}{2}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_{\alpha}} + \omega^{2}(\mathbf{k})\boldsymbol{E} \right) =$$

$$= \det \left( \boldsymbol{\Omega}(-\mathbf{k}) + \omega^{2}(\mathbf{k})\boldsymbol{E} \right).$$
(2.87)

Здесь использована вторая из формул (2.80) и тождество det  $\mathbf{A} = \det \mathbf{A}^{\top}$ . Видно, что матрицы  $\mathbf{\Omega}(\mathbf{k})$  и  $\mathbf{\Omega}(-\mathbf{k})$  имеют одинаковые собственные числа, следовательно выполняется формула (2.86).

Динамическая матрица обладает следующим важным свойством, которое сразу следует из определения:

$$\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k}) = \boldsymbol{\Omega}(-\mathbf{k})^*. \tag{2.88}$$

Покажем, что собственные векторы, **p**, динамической матрицы обладают свойством:

$$\boldsymbol{p}(\mathbf{k}) = \boldsymbol{p}(-\mathbf{k})^*. \tag{2.89}$$

По определению собственные векторы такие, что

$$\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})\boldsymbol{p}(\mathbf{k}) = \omega^{2}(\mathbf{k})\boldsymbol{p}(\mathbf{k}) \Rightarrow \boldsymbol{\Omega}(-\mathbf{k})\boldsymbol{p}(-\mathbf{k}) = \omega^{2}(-\mathbf{k})\boldsymbol{p}(-\mathbf{k}) \Rightarrow$$

$$\boldsymbol{\Omega}(-\mathbf{k})^{*}\boldsymbol{p}(-\mathbf{k})^{*} = \omega^{2}(-\mathbf{k})\boldsymbol{p}(-\mathbf{k})^{*} \Rightarrow \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})\boldsymbol{p}(-\mathbf{k})^{*} = \omega^{2}(\mathbf{k})\boldsymbol{p}(-\mathbf{k})^{*}.$$
(2.90)

Здесь использованы свойства (2.86) и (2.88). Из последнего равенства следует,
что  $p(-\mathbf{k})^*$  — собственный вектор матрицы  $\Omega(\mathbf{k})$ , соответствующий собственному числу  $\omega^2(\mathbf{k})$ . Следовательно, векторы  $p(\mathbf{k})$  и  $p(-\mathbf{k})^*$  коллинеарны. Если потребовать, чтобы собственные векторы были единичными, то получим (2.89).

Таким образом, построение дисперсионного соотношения сводится к отысканию собственных чисел динамической матрицы  $\Omega$ , определенной формулой (2.84). Данная матрица является эрмитовой. Дисперсионное соотношение симметрично относительно смены знака волнового вектора.

### 2.3.2.1 Некоторые свойства эрмитовых матриц

В предыдущем параграфе показано, что динамическая матрица решетки является эрмитовой. Поэтому в данном параграфе кратко перечисляются некоторые известные свойства эрмитовых матриц, необходимые для решения задач.

Комплексная матрица **Ω** называется эрмитовой, если она удовлетворяет соотношению:

$$\boldsymbol{\Omega} = \boldsymbol{\Omega}^{*\top}, \qquad (2.91)$$

где \* — знак комплексного сопряжения, Т — знак транспонирования.

Эрмитовы матрицы обладают следующими свойствами. Пусть  $\lambda_j$  — собственное число матрицы  $\boldsymbol{\Omega}$ , соответствующее правому собственному вектору  $\boldsymbol{p}_j$ :

$$\boldsymbol{\Omega}\boldsymbol{p}_j = \lambda_j \boldsymbol{p}_j. \tag{2.92}$$

Все собственные числа эрмитовой матрицы вещественны. Отсюда следует, что вектор  $\boldsymbol{p}_j^{*\top}$  является левым собственным вектором матрицы  $\boldsymbol{\Omega}$ . Действительно, транспонируя обе части (2.92) и делая операцию комплексного сопряжения, получим:

$$(\boldsymbol{\Omega}\boldsymbol{p}_j)^{*\top} = \boldsymbol{p}_j^{*\top}\boldsymbol{\Omega}^{*\top} = \boldsymbol{p}_j^{*\top}\boldsymbol{\Omega} = \lambda_j \boldsymbol{p}_j.$$
(2.93)

Здесь использована формула (2.91) и вещественность собственных чисел.

Далее будет показано, что квадраты собственных частот решетки являют-

ся собственными числами динамической матрицы, которая является эрмитовой. Для устойчивости решетки необходимо, чтобы собственные частоты были вещественными, а их квадраты — положительными. Следовательно, динамическая матрица должна быть не только эрмитовой, но и положительно определенной.

Собственные векторы эрмитовой матрицы, соответствующие различным собственным числам, ортогональны. Ограничимся случаем, когда все собственные числа различны. Тогда для нормированных собственных векторов выполняется тождество:

$$\boldsymbol{p}_i^{*\top}\boldsymbol{p}_j = \boldsymbol{p}_i^{\top}\boldsymbol{p}_j^* = \delta_{ij}.$$
(2.94)

Эрмитова матрица может быть представлена в виде:

$$\boldsymbol{\Omega} = \boldsymbol{P} \boldsymbol{\Lambda} \boldsymbol{P}^{*\top}, \qquad (2.95)$$

где  $P = \{p_1, p_2, .., p_N\}$  — матрица, столбцы которой являются собственными векторами  $\Omega$ ;  $\Lambda$  — диагональная матрица, составленная из собственных чисел  $\Omega$ . Матрица P является унитарной, т.е. обладает свойством:

$$\boldsymbol{P}^{*\top}\boldsymbol{P} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{P}^{*\top} = \boldsymbol{E}.$$
 (2.96)

Также далее будет использоваться тождество, справедливое для любой квадратной матрицы **A**:

$$\operatorname{tr}\left(\boldsymbol{P}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P}^{*\top}\right) = \operatorname{tr}\boldsymbol{A}.$$
 (2.97)

Число собственных векторов равно размерности пространства и они ортогональны (значит, линейно независимы). Следовательно, их можно использовать в качестве базиса. Представим вектор-столбец **a** в базисе **p**<sub>i</sub>:

$$\boldsymbol{a} = \sum_{j=1}^{N} a_j \boldsymbol{p}_j. \tag{2.98}$$

Домножая обе части на  $\boldsymbol{p}_i^{* op}$ , можно показать, что координаты  $a_i$  вектора  $\boldsymbol{a}$  вычисляются по формуле:

$$a_i = \boldsymbol{p}_i^{*\top} \boldsymbol{a}. \tag{2.99}$$

Тогда представление (2.98) вектора **а** принимает вид:

$$\boldsymbol{a} = \sum_{j=1}^{N} \left( \boldsymbol{p}_{j}^{*\top} \boldsymbol{a} \right) \boldsymbol{p}_{j} = \left( \sum_{j=1}^{N} \boldsymbol{p}_{j} \boldsymbol{p}_{j}^{*\top} \right) \boldsymbol{a}.$$
(2.100)

Рассмотрим матрицу в правой части. Нетрудно видеть, что она эрмитова:

$$\left(\sum_{j=1}^{N} \boldsymbol{p}_{j} \boldsymbol{p}_{j}^{*\top}\right)^{*\top} = \sum_{j=1}^{N} \left(\boldsymbol{p}_{j}^{*\top}\right)^{*\top} \boldsymbol{p}_{j}^{*\top} = \sum_{j=1}^{N} \boldsymbol{p}_{j} \boldsymbol{p}_{j}^{*\top}.$$
 (2.101)

Покажем, что если произведение эрмитовой матрицы **B** на произвольный комплексный вектор справа равно этому вектору, то эта матрица единичная. Рассмотрим произвольный вектор **c** и эрмитову матрицу **B** такую, что

$$Bc = c. (2.102)$$

Докажем, что произведение матрицы **B** на любую строку равно той же строке, т.е.  $\boldsymbol{c}^{\top}\boldsymbol{B} = \boldsymbol{c}^{\top}$ . Формула (2.102) справедлива для произвольного вектора. Значит она выполняется для  $\boldsymbol{c}^*$ :

$$\boldsymbol{B}\boldsymbol{c}^* = \boldsymbol{c}^*. \tag{2.103}$$

Транспонируя обе части формулы (2.102) и выполняя комплексное сопряжение, получим:

$$\boldsymbol{c}^{*\top}\boldsymbol{B}^{\top} = \boldsymbol{c}^{*\top} \Rightarrow \boldsymbol{c}^{\top}\boldsymbol{B}^{*\top} = \boldsymbol{c}^{\top} \Rightarrow \boldsymbol{c}^{\top}\boldsymbol{B} = \boldsymbol{c}^{\top}.$$
 (2.104)

Следовательно, матрица, обладающая свойством (2.102), — единичная, т.к. ее произведение на любую строку слева и на любой вектор справа равно этой же

строке/столбцу. Из доказанного факта и формулы (2.100) следует, что

$$\sum_{j=1}^{N} \boldsymbol{p}_{j} \boldsymbol{p}_{j}^{*\top} = \boldsymbol{E}.$$
(2.105)

Далее свойства эрмитовых матриц, их собственных векторов и собственных чисел будут активно использоваться при решении задач динамики и при описании переходных процессов в сложных решетках.

# 2.3.3 Уравнение динамики ковариаций

В силу случайности рассматриваемых начальных условий, скорости частиц в любой момент времени также являются случайными. Далее нас будут интересовать не случайные величины, а статистические характеристики, например, математическое ожидание кинетической энергии, которое может трактоваться как величина, пропорциональная кинетической температуре. Для того чтобы ввести статистические характеристики, рассматривается бесконечное множество реализаций начальных условий (2.81).

В гармонических кристаллах кинетические энергии, соответствующие разным степеням свободы, вообще говоря, различны. Поэтому, для того чтобы охарактеризовать распределение энергии по степеням свободы элементарной ячейки, вводится матрица **T** размерности  $N \times N$ :

$$\boldsymbol{T}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \boldsymbol{M}^{\frac{1}{2}} \left\langle \boldsymbol{v}(\mathbf{x}) \boldsymbol{v}(\mathbf{x})^{\top} \right\rangle \boldsymbol{M}^{\frac{1}{2}} \quad \Leftrightarrow \quad T_{ij} = \frac{1}{2} \sqrt{M_i M_j} \left\langle v_i v_j \right\rangle, \quad (2.106)$$

где  $M^{\frac{1}{2}}M^{\frac{1}{2}} = M$ ;  $M_i$  — элемент *ii* матрицы M, равный массе, соответствующей *i*ой степени свободы элементарной ячейки. Диагональный элемент  $T_{ii}$  называется кинетической энергий, соответствующей степени свободы номер *i* элементарной ячейки. Внедиагональный элемент  $T_{ij}$  характеризует корреляцию между компонентами *i*, *j* столбца скоростей  $v(\mathbf{x})$ .

Также используется кинетическая энергия элементарной ячейки Т:

$$T(\mathbf{x}) = \frac{1}{N} \operatorname{tr} \boldsymbol{T}(\mathbf{x}), \qquad (2.107)$$

где N — число степеней свободы элементарной ячейки, tr(..) — след (сумма диагональных элементов) матрицы. В случае, если кинетическая энергия равномерно распределена по степеням свободы элементарной ячейки, все кинетические энергии  $T_{ii}$  равны T.

Далее выводится уравнение, описывающее динамику обобщенной кинетической энергии, определяемой формулой:

$$\boldsymbol{K}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{M}^{\frac{1}{2}} \langle \boldsymbol{v}(\mathbf{x})\boldsymbol{v}(\mathbf{y})^{\top} \rangle \boldsymbol{M}^{\frac{1}{2}}, \qquad \boldsymbol{Z} = \frac{1}{2}\boldsymbol{M}^{\frac{1}{2}} \langle \ddot{\mathbf{u}}(\mathbf{x})\ddot{\mathbf{u}}(\mathbf{y})^{\top} \rangle \boldsymbol{M}^{\frac{1}{2}}, \quad (2.108)$$

где ⊤ — знак транспонирования. Заметим, что обобщенная кинетическая энергия связана с матрицей **T** соотношением:

$$\boldsymbol{T} = \boldsymbol{K}(\mathbf{x}, \mathbf{x}). \tag{2.109}$$

Дифференцируя величины (2.108) по времени с учетом уравнения движения (2.78), получим:

$$\ddot{\boldsymbol{K}} = \boldsymbol{D}_{x}\boldsymbol{K} + \boldsymbol{K}\boldsymbol{D}_{y}^{\top} + 2\boldsymbol{Z}, \qquad \ddot{\boldsymbol{Z}} = \boldsymbol{D}_{x}\boldsymbol{Z} + \boldsymbol{Z}\boldsymbol{D}_{y}^{\top} + 2\boldsymbol{D}_{x}\boldsymbol{K}\boldsymbol{D}_{y}^{\top},$$
$$\boldsymbol{D}_{x}\boldsymbol{K} = \sum_{\alpha} \boldsymbol{M}^{-\frac{1}{2}}\boldsymbol{C}_{\alpha}\boldsymbol{M}^{-\frac{1}{2}}\boldsymbol{K}\left(\mathbf{x} + \mathbf{a}_{\alpha}, \mathbf{y}\right),$$
$$\boldsymbol{K}\boldsymbol{D}_{y}^{\top} = \sum_{\alpha}^{\alpha} \boldsymbol{K}\left(\mathbf{x}, \mathbf{y} + \mathbf{a}_{\alpha}\right)\boldsymbol{M}^{-\frac{1}{2}}\boldsymbol{C}_{\alpha}^{\top}\boldsymbol{M}^{-\frac{1}{2}}.$$
$$(2.110)$$

Исключая Z из данной системы уравнений, получим:

$$\ddot{\boldsymbol{K}} - 2\left(\boldsymbol{D}_{x}\ddot{\boldsymbol{K}} + \ddot{\boldsymbol{K}}\boldsymbol{D}_{y}^{\top}\right) + \boldsymbol{D}_{x}^{2}\boldsymbol{K} - 2\boldsymbol{D}_{x}\boldsymbol{K}\boldsymbol{D}_{y}^{\top} + \boldsymbol{K}\left(\boldsymbol{D}_{y}^{\top}\right)^{2} = 0, \qquad (2.111)$$

где  $\boldsymbol{D}_x^2 = \boldsymbol{D}_x \boldsymbol{D}_x.$ 

Представим обобщенную кинетическую энергию в виде функции пространственной координаты  $\mathbf{r} = \frac{1}{2}(\mathbf{x} + \mathbf{y})$  и ковариационной координаты  $\mathbf{x} - \mathbf{y}$ :

$$\boldsymbol{K}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \boldsymbol{K}\left(\frac{\mathbf{x}+\mathbf{y}}{2},\mathbf{x}-\mathbf{y}\right).$$
(2.112)

В случае однородного распределения начальной энергии по пространству, функция **K** не зависит от **r**. Тогда справедливы соотношения:

$$D_{x}K = \sum_{\alpha} M^{-\frac{1}{2}}C_{\alpha}M^{-\frac{1}{2}}K(\mathbf{x} - \mathbf{y} + \mathbf{a}_{\alpha}) = DK,$$
  

$$KD_{y}^{\top} = \sum_{\alpha} K(\mathbf{x} - \mathbf{y} - \mathbf{a}_{\alpha})M^{-\frac{1}{2}}C_{\alpha}^{\top}M^{-\frac{1}{2}} = \sum_{\alpha} K(\mathbf{x} - \mathbf{y} + \mathbf{a}_{\alpha})M^{-\frac{1}{2}}C_{\alpha}M^{-\frac{1}{2}} =$$
  

$$= KD.$$
(2.113)

Здесь при выводе использовано тождество  $C_{\alpha} = C_{-\alpha}^{\top}$ . В результате получаем следующие формулы для операторов:

$$\boldsymbol{D}_x = \boldsymbol{D}_y^\top = \boldsymbol{D}. \tag{2.114}$$

Подставляя выражения для операторов (2.114) в уравнение (2.111), получим:

$$\ddot{\boldsymbol{K}} - 2\left(\boldsymbol{D}\ddot{\boldsymbol{K}} + \ddot{\boldsymbol{K}}\boldsymbol{D}\right) + \boldsymbol{D}^{2}\boldsymbol{K} - 2\boldsymbol{D}\boldsymbol{K}\boldsymbol{D} + \boldsymbol{K}\boldsymbol{D}^{2} = 0.$$
(2.115)

Здесь  $D^2 K = D(DK)$ . Начальные условия для K, соответствующие начальным условиям (2.81), имеют вид:

$$\boldsymbol{K} = \boldsymbol{K}_0 = \boldsymbol{T}_0 \delta_D(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \qquad \dot{\boldsymbol{K}} = 0, \qquad \ddot{\boldsymbol{K}} = \boldsymbol{D}\boldsymbol{K}_0 + \boldsymbol{K}_0\boldsymbol{D}, \quad \ddot{\boldsymbol{K}} = 0,$$
(2.116)

где  $\delta(0) = 1$ ;  $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = 0$  при  $\mathbf{x} \neq \mathbf{y}$ .

Уравнение (2.115) описывает динамику обобщенных кинетических энергий

в случае однородного начального распределения энергии.

## 2.3.4 Колебания кинетических энергий

В настоящем параграфе строится точное аналитическое решение уравнения (2.115) с начальными условиями (2.116). Решение дает точное выражение для кинетических энергий, соответствующих степеням свободы элементарной ячейки.

Решение получается с использованием дискретного преобразования Фурье по переменной **x** – **y**. Векторы **x** – **y** образуют ту же решетку, что и векторы **x**, поэтому справедливо:

$$\mathbf{x} - \mathbf{y} = \sum_{j=1}^{d} z_j \mathbf{b}_j, \qquad (2.117)$$

где  $\mathbf{b}_j, j = 1, .., d$  — базисные векторы решетки;  $z_j$  — целые числа; d — размерность пространства.

Применяя дискретное преобразование Фурье в формулах (2.115), (2.116), получим уравнение

$$\hat{\mathbf{K}}^{,\dots} + 2\left(\boldsymbol{\Omega}\hat{\mathbf{K}} + \hat{\mathbf{K}}\boldsymbol{\Omega}\right) + \boldsymbol{\Omega}^{2}\hat{\mathbf{K}} - 2\boldsymbol{\Omega}\hat{\mathbf{K}}\boldsymbol{\Omega} + \hat{\mathbf{K}}\boldsymbol{\Omega}^{2} = 0,$$

$$\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k}) = -\sum_{\alpha} \boldsymbol{M}^{-\frac{1}{2}}\boldsymbol{C}_{\alpha}\boldsymbol{M}^{-\frac{1}{2}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_{\alpha}},$$
(2.118)

с начальными условиями

$$\hat{\boldsymbol{K}} = \boldsymbol{T}_0, \qquad \dot{\hat{\boldsymbol{K}}} = 0, \qquad \ddot{\hat{\boldsymbol{K}}} = -\left(\boldsymbol{\Omega}\boldsymbol{T}_0 + \boldsymbol{T}_0\boldsymbol{\Omega}\right), \qquad \dot{\hat{\boldsymbol{K}}} = 0.$$
 (2.119)

Здесь использованы тождества  $\Phi (\mathbf{K}(\mathbf{x} - \mathbf{y} + \mathbf{a}_{\alpha})) = \hat{\mathbf{K}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_{\alpha}}, \Phi(\delta_D(\mathbf{x} - \mathbf{y})) = 1,$   $\Phi (\mathbf{D}\mathbf{K}) = -\mathbf{\Omega}\hat{\mathbf{K}}, \Phi (\mathbf{D}^2\mathbf{K}) = -\mathbf{\Omega}\Phi (\mathbf{D}\mathbf{K}) = \mathbf{\Omega}^2\hat{\mathbf{K}},$ где  $\hat{\mathbf{K}} - \Phi$ урье-образ  $\mathbf{K};$  $i^2 = -1; \mathbf{k}$  — волновой вектор;  $\tilde{\mathbf{b}}_j$  —векторы сопряженного базиса, т.е.  $\tilde{\mathbf{b}}_j \cdot \mathbf{b}_k = \delta_{jk}.$ 

Матрица  $\boldsymbol{\Omega}$  в формуле (2.118) совпадает с введенной ранее динамической

матрицей решетки. Для упрощения уравнения (2.118) воспользуемся тем, что матрица **П** — эрмитова. Поэтому она представляется в виде:

$$\boldsymbol{\Omega} = \boldsymbol{P} \boldsymbol{\Lambda} \boldsymbol{P}^{*\top}, \qquad \boldsymbol{\Lambda}_{ij} = \omega_j^2 \delta_{ij}, \qquad (2.120)$$

где  $\omega_j^2, j = 1, ..., N$  — собственные числа матрицы  $\Omega$ ,  $\omega_j(\mathbf{k})$  — ветки дисперсионного соотношения решетки (ниже рассматриваются только положительные частоты  $\omega_j(\mathbf{k}) \ge 0$ ); \* — знак комплексного сопряжения; матрица P составлена из нормированных собственных векторов матрицы  $\Omega$ , которые часто называют векторами поляризации [32].

Подставим представление (2.120) в уравнение (2.118) и умножим обе части слева на  $P^{*\top}$  и справа на P. В результате получим систему несвязанных обыкновенных дифференциальных уравнений для элементов матрицы  $K' = P^{*\top} \hat{K} P$ :

$$\begin{aligned} \ddot{\boldsymbol{K}}' + 2\left(\boldsymbol{\Lambda}\ddot{\boldsymbol{K}}' + \ddot{\boldsymbol{K}}'\boldsymbol{\Lambda}\right) + \boldsymbol{\Lambda}^{2}\boldsymbol{K}' - 2\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{K}'\boldsymbol{\Lambda} + \boldsymbol{K}'\boldsymbol{\Lambda}^{2} &= 0 \Leftrightarrow \\ & \vdots \\ \Leftrightarrow \ddot{K}'_{ij} + 2(\omega_{i}^{2} + \omega_{j}^{2})\ddot{K}'_{ij} + (\omega_{i}^{2} - \omega_{j}^{2})^{2}K'_{ij} = 0. \end{aligned}$$
(2.121)

Аналогичные преобразования в формуле (2.119) дают начальные условия для K'. Решая уравнения (2.121) с начальными условиями, используя связь матриц T и K и применяя обратное дискретное преобразование Фурье, получим:

$$\boldsymbol{T} = \int_{\mathbf{k}} \boldsymbol{P} \boldsymbol{T}' \boldsymbol{P}^{*\top} d\mathbf{k}, \qquad T'_{ij} = \frac{1}{2} \{ \boldsymbol{P}^{*\top} \boldsymbol{T}_0 \boldsymbol{P} \}_{ij} \left[ \cos((\omega_i - \omega_j)t) + \cos((\omega_i + \omega_j)t) \right].$$
(2.122)

Здесь  $\{...\}_{ij}$  — элемент матрицы с индексами  $i, j; \omega_i(\mathbf{k}) \ge 0, i = 1, ..., N$ . Интегрирование ведется по безразмерным компонентам волнового вектора **k**. Формула (2.122) определяет изменение во времени кинетических энергий, соответствующих степеням свободы элементарной ячейки.

В случае, когда начальная кинетическая энергия равно распределена по сте-

пеням свободы элементарной ячейки  $\boldsymbol{T}_0 = T_0 \boldsymbol{E}$ , формула (2.122) принимает вид

$$\boldsymbol{T} = \frac{T_0}{2} \left( \boldsymbol{E} + \int_{\mathbf{k}} \boldsymbol{P} \boldsymbol{B}(t) \boldsymbol{P}^{*\top} d\mathbf{k} \right), \qquad B_{ij} = \cos(2\omega_j t) \delta_{ij}, \qquad (2.123)$$

где E — единичная матрица, т.е.  $E_{ij} = \delta_{ij}$ . Формула (2.123) показывает, что при переходе к равновесию матрица T, вообще говоря, не шаровая. Иными словами, энергии, соответствующие степеням свободы элементарной ячейки, отличаются, даже если их начальные значения равны. В общем случае матрица P является комплексной. Следовательно матрицы  $P^{*\top}T_0P$  и  $PBP^{*\top}$  в формулах (2.122), (2.123) тоже комплексные. Однако результирующая матрица T — вещественная. Данный факт можно доказать, используя следующие свойства:  $P(\mathbf{k}) = P(-\mathbf{k})^*$ ,  $\omega_j^2(\mathbf{k}) = \omega_j^2(-\mathbf{k})$ . Таким образом, формула (2.122) в *точности* описывает изменение кинетических энергий во времени.

Далее с использованием формулы (2.122) исследуется поведение кинетической энергии элементарной ячейки *T* (см. формулы (2.106), (2.107)). Математическое ожидание полной механической энергии ячейки сохраняется, поэтому изменение кинетической энергии вызвано перераспределением энергии между кинетической и потенциальной.

Кинетическая энергия вычисляется с использованием формулы (2.122) и тождества tr  $(\boldsymbol{PT'P^{*\top}}) = \text{tr}T'$ :

$$T = \frac{T_0}{2} \left[ 1 + \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \int_{\mathbf{k}} \left( 1 + \frac{\{ \mathbf{P}^{*\top} \operatorname{dev} \mathbf{T}_0 \mathbf{P} \}_{jj}}{T_0} \right) \cos\left(2\omega_j(\mathbf{k})t\right) d\mathbf{k} \right], \qquad (2.124)$$

где dev $T_0 = T_0 - T_0 E$ ,  $T_0 = \frac{1}{N} \text{tr} T_0$ . Формула (2.124) показывает, что на поведение полной кинетической энергии T влияет ее начальное распределение по степеням свободы ячейки. Соответствующий пример приведен ниже.

В случае равного распределения начальной кинетической энергии по степе-

ням свободы (dev $\boldsymbol{T}_0=0$ ) формула (2.124) принимает вид

$$T = \frac{T_0}{2} \left[ 1 + \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \int_{\mathbf{k}} \cos(2\omega_j(\mathbf{k})t) \, \mathrm{d}\mathbf{k} \right].$$
(2.125)

Данное выражение также можно получить, вычисляя след в формуле (2.123).

Формула (2.125) справедлива для решеток с произвольным числом степеней свободы элементарной ячейки. Она обобщает результаты, полученные в работах [6, 240, 245, 246] для нескольких одномерных и двумерных простых решеток. В случае скалярных решеток (N = 1), формула (2.125) совпадает с выражением, полученным выше.

Подынтегральные выражения в формулах (2.124), (2.125) — быстро осциллирующие знакопеременные функции. Интегралы такого типа, как правило, стремятся к нулю при стремлении большого параметра (времени) к бесконечности [47]. Следовательно, кинетическая энергия стремится к  $\frac{T_0}{2}$ . Уменьшение кинетической энергии связано с переходом части энергии в потенциальную. Отметим, что данный переход в бесконечных кристаллах происходит необратимо.

Исследование асимптотического поведения интегралов (2.124), (2.125) на больших временах — сложная отдельная задача. Однако на основании общих результатов, полученных методом стационарной фазы [47], можно предположить, что величина  $T - T_0/2$  стремится к нулю как  $1/t^{\frac{d}{2}}$ , где d — размерность пространства. Подтверждение данного факта для некоторых конкретных решеток приведено в работах [6, 240, 197]. Строгий вывод выходит за рамки данной работы.

Формулы (2.122), (2.124), (2.125) можно обобщить на случай конечного кристалла при периодических граничных условиях. В таком случае интегралы, соответствующие обратному преобразованию Фурье, заменяются на суммы. При этом возникают новые интересные эффекты, например, тепловое эхо [156].

Таким образом, изменение матрицы T при переходе к равновесию в точности описывается формулой (2.122). Переход сопровождается двумя процессами: выравниванием кинетической и потенциальной энергий (формулы (2.124), (2.125)) и перераспределением энергии по степеням свободы элементарной ячейки. С математической точки зрения первый процесс связан с изменением tr**T**, а второй — с изменением dev**T**.

# 2.3.4.1 Об асимптотическом поведении кинетической энергии в одномерных цепочках

Рассмотрим асимптотическое поведение кинетической энергии на больших временах в одномерных цепочках. Запишем формулу (2.125) для бесконечной одномерной цепочки:

$$T = \frac{T_0}{2} \left( 1 + \frac{1}{2\pi N} \sum_{k=1}^N \int_0^{2\pi} \cos(2\omega_k t) dp \right).$$
(2.126)

Рассмотрим интеграл в правой части. Перейдем в нем от интегрирования по волновому вектору к интегрированию по спектру:

$$\int_{0}^{2\pi} \cos(2\omega_{j}t) dp = a \int \frac{\cos(2\omega_{j}t)}{c_{g,j}(\omega_{j})} d\omega_{j},$$

$$c_{g,j} = |\mathbf{c}_{g,j}|, \qquad \mathbf{c}_{g,j} = \frac{d\omega_{j}}{d\mathbf{k}}, \qquad \mathbf{k} = \frac{p}{a}\mathbf{e},$$
(2.127)

где е — вектор, направленный вдоль цепочки. Видно, что колебания кинетической энергии описываются интегралом от функции, осциллирующей с частотой, пропорциональной времени. Асимптотическое поведение таких интегралов при стремлении параметра t к бесконечности хорошо изучено. В частности, известно, что основной вклад в асимптотику вносят точки, в которых подинтегральная функция имеет особенности. В рассматриваемом случае особые точки это частоты, на которых групповая скорость обращается в ноль. Следовательно, в колебания энергии на "больших" временах основной вклад вносят частоты, соответствующие нулевым групповым скоростям. На практике асимптотическая формула может довольно быстро сходиться к точному решению. В многомерном случае, к сожалению, ситуация обстоит сложнее, т.к. обратное дискретное преобразование Фурье в формуле (2.125) превращается в кратный интеграл. Однако для некоторых конкретных решеток удается доказать аналогичный факт. В частности, в работе [197] при исследовании колебаний энергий в треугольной решетке было показано, что основной вклад в асимптотику также вносят частоты, соответствующие нулевым групповым скоростям.

## 2.3.5 Дополнительные законы сохранения

В настоящем параграфе выводятся дополнительные законы сохранения, с помощью которых далее будут вычисляться равновесные значения кинетических энергий элементарной ячейки.

Введем обобщенный гамильтониан **H** и лагранжиан **L** [246]:

$$H = K + \Pi, \qquad L = K - \Pi, \qquad \Pi = -\frac{1}{4} \left( D_x U + U D_y^{\mathrm{T}} \right),$$
$$U = M^{\frac{1}{2}} \left\langle \mathbf{u}(\mathbf{x}) \mathbf{u}(\mathbf{y})^{\mathrm{T}} \right\rangle M^{\frac{1}{2}}.$$
(2.128)

Дифференцируя **К** и **U**, получим следующую систему уравнений:

$$\ddot{\boldsymbol{K}} = \boldsymbol{D}_x \boldsymbol{K} + \boldsymbol{K} \boldsymbol{D}_y^{\top} + \boldsymbol{D}_x \boldsymbol{U} \boldsymbol{D}_y^{\top}, \qquad \ddot{\boldsymbol{U}} = \boldsymbol{D}_x \boldsymbol{U} + \boldsymbol{U} \boldsymbol{D}_y^{\top} + 4\boldsymbol{K}.$$
 (2.129)

Исключая **К** из данной системы, получим

$$\ddot{\boldsymbol{U}} - 2\left(\boldsymbol{D}_{x}\ddot{\boldsymbol{U}} + \ddot{\boldsymbol{U}}\boldsymbol{D}_{y}^{\top}\right) + \boldsymbol{D}_{x}^{2}\boldsymbol{U} - 2\boldsymbol{D}_{x}\boldsymbol{U}\boldsymbol{D}_{y}^{\top} + \boldsymbol{U}\left(\boldsymbol{D}_{y}^{\top}\right)^{2} = 0.$$
(2.130)

Следовательно, **U** удовлетворяет тому же уравнению, что и **K**.

Вычислим производную по времени от обобщенного гамильтониана:

$$\dot{\boldsymbol{H}} = \frac{1}{4} \left( \boldsymbol{D}_{x} \boldsymbol{W} - \boldsymbol{W} \boldsymbol{D}_{y}^{\mathrm{T}} \right), \qquad \boldsymbol{W} = \boldsymbol{M}^{\frac{1}{2}} \left\langle \mathbf{u}(\mathbf{x}) \boldsymbol{v}(\mathbf{y})^{\mathrm{T}} - \boldsymbol{v}(\mathbf{x}) \mathbf{u}(\mathbf{y})^{\mathrm{T}} \right\rangle \boldsymbol{M}^{\frac{1}{2}}.$$
(2.131)

В случае однородных начальных условий выполняется  $W = W(\mathbf{x} - \mathbf{y})$  и $D_x W = DW, W D_y^{\mathrm{T}} = W D$ , тогда

$$\dot{\boldsymbol{H}} = \frac{1}{4} \left( \boldsymbol{D}\boldsymbol{W} - \boldsymbol{W}\boldsymbol{D} \right).$$
(2.132)

Домножая уравнение (2.132) на  $D^n$ , вычисляя след и используя тождество tr (AB) = tr (BA), получим следующие законы сохранения

$$\operatorname{tr}(\boldsymbol{D}^{n}\boldsymbol{H}) = \operatorname{tr}(\boldsymbol{D}^{n}\boldsymbol{H}_{0}), \qquad n = 0, 1, 2, ..,$$
 (2.133)

где  $H_0$  — начальное значение обобщенного гамильтониана. Для n = 0 и  $\mathbf{x} = \mathbf{y}$  формула (2.133) соответствует обычному закону сохранения энергии. Формула (2.133) также может быть переписана для следа и девиатора обобщенного гамильтониана:

$$\operatorname{tr} \boldsymbol{H} = \operatorname{tr} \boldsymbol{H}_0, \qquad \operatorname{tr} \left( \boldsymbol{D}^n \operatorname{dev} \boldsymbol{H} \right) = \operatorname{tr} \left( \boldsymbol{D}^n \operatorname{dev} \boldsymbol{H}_0 \right), \qquad n = 0, 1, 2...$$
 (2.134)

Далее полученные законы сохранения используются для вычисления равновесных (стационарных) значений кинетических энергий.

# 2.3.6 Равновесные значения кинетических энергий

Найдем стационарное состояние системы, в котором вторые производные от ковариаций скоростей и перемещений равны нулю. При этом обобщенный лагранжиан также обращается в ноль в силу следующего соотношения:

$$\boldsymbol{L} = \frac{1}{4} \ddot{\boldsymbol{U}}.$$
 (2.135)

Следовательно, в стационарном состоянии:

$$\boldsymbol{K}_{eq} = \boldsymbol{\Pi}_{eq} = \frac{1}{2} \boldsymbol{H}_{eq}.$$
 (2.136)

В силу закона сохранения энергии шаровые части обобщенных кинетической и потенциальной энергий вычисляются на основе начальных условий:

$$tr \boldsymbol{K}_{eq} = tr \boldsymbol{\Pi}_{eq} = \frac{1}{2} tr \boldsymbol{H}_0, \qquad (2.137)$$

где  $H_0$  — начальное значение обобщенного гамильтониана.

Остается определить значения девиаторов обобщенных энергий. Обобщенный гамильтониан удовлетворяет тому же уравнению 4 порядка, что и K. В данном уравнении положим равными нулю все слагаемые, содержащие производные по времени. Также воспользуемся законами сохранения (2.133), которые можно переписать для dev H. В результате получим замкнутую систему алгебраических уравнений для определения dev H:

$$D^2 \operatorname{dev} H - 2D \operatorname{dev} HD + \operatorname{dev} HD^2 = 0$$
 tr  $(D^n \operatorname{dev} H) = \operatorname{tr} (D^n \operatorname{dev} H_0)$ .  
(2.138)

В частном случае кристаллов с простой решеткой данная система получена в работе [246].

Решим систему уравнений (2.138). Применим к ней дискретное преобразование Фурье и воспользуемся представлением (2.120) для матрицы **Ω**. Тогда система уравнений (2.138) принимает вид:

$$\boldsymbol{\Lambda}^{2}\boldsymbol{H}' - 2\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{H}'\boldsymbol{\Lambda} + \boldsymbol{H}'\boldsymbol{\Lambda}^{2} = 0, \qquad \operatorname{tr}\left(\boldsymbol{\Lambda}^{n}\boldsymbol{H}'\right) = \operatorname{tr}\left(\boldsymbol{\Omega}^{n}\operatorname{dev}\hat{\boldsymbol{H}}_{0}\right),$$
$$(2.139)$$
$$\boldsymbol{H}' = \boldsymbol{P}^{*\top}\operatorname{dev}\hat{\boldsymbol{H}}\boldsymbol{P}.$$

Покажем, что из первого уравнения следует, что матрица **H**' — диагональная. Перепишем первое из уравнений (2.139) в виде:

$$\{\boldsymbol{\Lambda}^{2}\boldsymbol{H}'-2\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{H}'\boldsymbol{\Lambda}+\boldsymbol{H}'\boldsymbol{\Lambda}^{2}\}_{ij}=(\omega_{i}^{2}-\omega_{j}^{2})^{2}H'_{ij}=0.$$
 (2.140)

Отсюда следует, что  $H'_{ij} = 0$  для всех  $i \neq j$ . Иными словами, матрица H' —

диагональная. Тогда будем искать решение системы (2.139) в виде:

$$\boldsymbol{H}' = \operatorname{diag}\left(H'_{jj}\right), \qquad \operatorname{tr}\boldsymbol{H}' = 0. \tag{2.141}$$

Подстановка (2.141) во второе из уравнений (2.139) дает:

$$\sum_{j=1}^{N} \omega_j^2 H'_{jj} = \operatorname{tr} \left( \boldsymbol{\Omega} \operatorname{dev} \hat{\boldsymbol{H}}_0 \right),$$
  
... (2.142)
$$\sum_{j=1}^{N} \omega_j^{2n} H'_{jj} = \operatorname{tr} \left( \boldsymbol{\Omega}^n \operatorname{dev} \hat{\boldsymbol{H}}_0 \right).$$

Правую часть можно представить в виде:

$$\operatorname{tr}\left(\boldsymbol{\Omega}^{n}\operatorname{dev}\hat{\boldsymbol{H}}_{0}\right) = \sum_{j=1}^{N} \omega_{j}^{2n} \{\boldsymbol{P}^{*\top}\operatorname{dev}\hat{\boldsymbol{H}}_{0}\boldsymbol{P}\}_{jj}.$$
(2.143)

С учетом данной формулы легко угадать решение системы уравнений (2.142):

$$\boldsymbol{H}' = \operatorname{diag}\left(\boldsymbol{P}^{*\top} \operatorname{dev} \hat{\boldsymbol{H}}_0 \boldsymbol{P}\right).$$
(2.144)

Тогда, используя определение матрицы  $\boldsymbol{H}'$ , получим:

$$\operatorname{dev}\hat{\boldsymbol{H}} = \boldsymbol{P}\operatorname{diag}\left(\boldsymbol{P}^{*\top}\operatorname{dev}\hat{\boldsymbol{H}}_{0}\boldsymbol{P}\right)\boldsymbol{P}^{*\top}.$$
(2.145)

Применяя обратное дискретное преобразование Фурье и используя связь обобщенного гамильтониана с обобщенной кинетической энергией в стационарном состоянии (2.136), получим:

tr
$$\mathbf{K}_{eq} = \frac{1}{2}$$
tr $\mathbf{H}_0$ , dev $\mathbf{K}_{eq} = \frac{1}{2} \int_{\mathbf{k}} \mathbf{P} \operatorname{diag} \left( \mathbf{P}^{*\top} \operatorname{dev} \hat{\mathbf{H}}_0 \mathbf{P} \right) \mathbf{P}^{*\top} d\mathbf{k}$ . (2.146)

Формула (2.146) справедлива при произвольных однородных начальных усло-

виях. На основе данной формулы нетрудно вычислить равновесное значение матрицы **T**:

$$\boldsymbol{T}_{eq} = \frac{1}{2N} \operatorname{tr}\left(\boldsymbol{H}_{0}\right) \boldsymbol{E} + \frac{1}{2} \int_{\mathbf{k}} \boldsymbol{P} \operatorname{diag}\left(\boldsymbol{P}^{*\top} \operatorname{dev} \hat{\boldsymbol{H}}_{0} \boldsymbol{P}\right) \boldsymbol{P}^{*\top} \mathrm{d} \mathbf{k}.$$
(2.147)

Здесь в первом слагаемом  $H_0$  вычисляется при  $\mathbf{x} = \mathbf{y}$ . Заметим, что в формулу (2.146) входит только начальное значение гамильтониана и не входят начальные значения его производных.

В случае, когда частицы в начальный момент времени имеют случайные начальные скорости и нулевые перемещения, формула (2.146) упрощается:

tr
$$\boldsymbol{K} = \frac{1}{2} \text{tr} \boldsymbol{K}_0, \quad \text{dev} \boldsymbol{K} = \frac{1}{2} \int_{\boldsymbol{k}} \boldsymbol{P} \text{diag} \left( \boldsymbol{P}^{*\top} \text{dev} \boldsymbol{K}_0 \boldsymbol{P} \right) \boldsymbol{P}^{*\top} \text{d} \boldsymbol{k}.$$
 (2.148)

Соответствующее выражение для равновесного значения матрицы **T** принимает вид:

$$\boldsymbol{T}_{eq} = \frac{1}{2N} \operatorname{tr} \left( \boldsymbol{T}_{0} \right) \boldsymbol{E} + \frac{1}{2} \int_{\mathbf{k}} \boldsymbol{P} \operatorname{diag} \left( \boldsymbol{P}^{*\top} \operatorname{dev} \boldsymbol{T}_{0} \boldsymbol{P} \right) \boldsymbol{P}^{*\top} \mathrm{d} \mathbf{k}.$$
(2.149)

Таким образом, задача о распределении энергии по степеням свободы элементарной ячейки сводится к нахождению собственных векторов матрицы  $\Omega$  (столбцов матрицы P) и подстановке результатов в формулу (2.147) или формулу (2.149). Формулы (2.147), (2.149) заменяют теорему о равном распределении для гармонических кристаллов. Формула (2.149) показывает, что в случае если начальные кинетические энергии, соответствующие степеням свободы элементарной ячейки, равны (dev $T_0 = 0$ ), то они также равны в равновесном состоянии (dev $T_{eq} = 0$ ). Отметим, что при переходе к равновесию температурная матрица, вообще говоря, не шаровая, т.е. dev $T \neq 0$ .

Далее полученные общие формулы используются для описания переходных процессов и определения распределения энергии по степеням свободы в нескольких конкретных решетках.

# 2.3.7 Примеры

### 2.3.7.1 Пример. Цепочка с чередующимися массами и жесткостями

### Уравнения динамики

Рассмотрим двухатомную цепочку с чередующимися массами  $m_1$ ,  $m_2$  и жесткостями  $c_1$ ,  $c_2$  (см. рис. 2.5). Цепочка состоит из двух подрешеток, формируемых массами  $m_1$  и  $m_2$ . Данная модель часто рассматривается в качестве примера



Рис. 2.5: Две элементарные ячейки двухатомной цепочки. Частицы разного размера принадлежат разным подрешеткам.

системы с двумя дисперсионными ветками [32, 98, 185, 219].

Запишем уравнения движения в матричной форме (2.78). Элементарные ячейки нумеруются индексом j. Положение ячейки j задается вектором  $\mathbf{x}_j = j\mathbf{b}$ , где  $\mathbf{b}$  — базисный вектор, направленный вдоль цепочки. Каждая частица имеет одну степень свободы. Перемещения частиц ячейки j формируют столбец

$$\mathbf{u}_j = \mathbf{u}(\mathbf{x}_j) = \begin{bmatrix} u_{1j} & u_{2j} \end{bmatrix}^\top, \qquad (2.150)$$

где  $u_{1j}, u_{2j}$  — перемещения частиц с массами  $m_1$  и  $m_2$  соответственно. Тогда уравнения движения имеют вид:

$$\boldsymbol{M}\ddot{\mathbf{u}}_{j} = \boldsymbol{C}_{1}\mathbf{u}_{j+1} + \boldsymbol{C}_{0}\mathbf{u}_{j} + \boldsymbol{C}_{-1}\mathbf{u}_{j-1},$$
$$\boldsymbol{M} = \begin{bmatrix} m_{1} & 0 \\ 0 & m_{2} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{C}_{0} = \begin{bmatrix} -c_{1} - c_{2} & c_{1} \\ c_{1} & -c_{1} - c_{2} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{C}_{1} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ c_{2} & 0 \end{bmatrix}.$$
(2.151)

Здесь  $\boldsymbol{C}_{-1} = \boldsymbol{C}_1^\top$ .

В начальный момент времени частицы имеют случайные скорости и нулевые

перемещения:

$$u_{1j} = u_{2j} = 0, \quad \dot{u}_{1j} = \beta_j \sqrt{\frac{2}{m_1} T_{11}^0}, \quad \dot{u}_{2j} = \gamma_j \sqrt{\frac{2}{m_2} T_{22}^0},$$
 (2.152)

где  $T_{11}^0, T_{22}^0$  — начальные энергии подрешеток, независящие от  $j; \beta_j, \gamma_j$  — некоррелированные случайные числа с нулевым математическим ожиданием и единичной дисперсией, т.е.  $\left< \beta_j \right> = \left< \gamma_j \right> = 0, \left< \beta_j^2 \right> = \left< \gamma_j^2 \right> = 1, \left< \beta_i \gamma_j \right> = 0$  для всех i, j. Начальная матрица  $T_0$ , соответствующая условиям (2.152), имеет вид

$$\boldsymbol{T}_{0} = \begin{bmatrix} T_{11}^{0} & 0\\ 0 & T_{22}^{0} \end{bmatrix}, \qquad 2T_{11}^{0} = m_{1} \left\langle \dot{u}_{1j}^{2} \right\rangle, \qquad 2T_{22}^{0} = m_{2} \left\langle \dot{u}_{2j}^{2} \right\rangle. \tag{2.153}$$

Здесь скорости вычислены при t = 0.

Далее рассматривается поведение энергий подрешеток  $T_{11}, T_{22}$ .

#### Дисперсионное соотношение

Динамическая матрица  $\boldsymbol{\Omega}$  вычисляется по формуле (2.118). Подставляя выражения (2.151) для матриц  $\boldsymbol{C}_{\alpha}, \alpha = 0; \pm 1$  в формулу (2.118), получим:

$$\boldsymbol{\Omega} = \begin{bmatrix} \frac{c_1 + c_2}{m_1} & -\frac{c_1 + c_2 e^{-ip}}{\sqrt{m_1 m_2}} \\ -\frac{c_1 + c_2 e^{ip}}{\sqrt{m_1 m_2}} & \frac{c_1 + c_2}{m_2} \end{bmatrix}, \qquad \mathbf{k} = p\tilde{\mathbf{b}},$$
(2.154)

где **k** — волновой вектор; **b** · **b** = 1; *p* ∈ [0; 2*π*]. Вычисление собственных чисел динамической матрицы дает дисперсионное соотношение:

$$\omega_{1,2}^{2}(p) = \frac{\omega_{max}^{2}}{2} \left( 1 \pm \sqrt{1 - \frac{16m_{1}m_{2}c_{1}c_{2}\sin^{2}\frac{p}{2}}{(m_{1} + m_{2})^{2}(c_{1} + c_{2})^{2}}} \right), \qquad (2.155)$$
$$\omega_{max}^{2} = \frac{(c_{1} + c_{2})(m_{1} + m_{2})}{m_{1}m_{2}},$$

где индекс 1 у частоты соответствует знаку плюс. Функции  $\omega_1(p), \omega_2(p)$  называются оптической и акустической ветками дисперсионного соотношения. От-

метим, что  $\omega_{1,2}/\omega_{max}$  одинаково зависит от  $m_1/m_2$  и  $c_1/c_2$ . Дисперсионное соотношение для разных значений отношений жесткостей показано на рис. 2.6.



Рис. 2.6: Дисперсионное соотношение для цепочки с чередующимися жесткостями ( $m_1 = m_2$ ). Кривые соответствуют разным отношениям жесткостей:  $\frac{c_1}{c_2} = 1$  (сплошная линия);  $\frac{1}{2}$  (точки);  $\frac{1}{4}$  (пунктир);  $\frac{1}{8}$  (штрих-пунктир).

Вычислим поляризационную матрцу  $\boldsymbol{P}$ . По определению матрица  $\boldsymbol{P}$  состоит из нормированных собственных векторов динамической матрицы  $\boldsymbol{\Omega}$ . Собственные векторы  $\boldsymbol{d}_{1,2}$ , соответствующие собственным числам  $\omega_{1,2}^2$  (формула (2.155)), имеют вид:

$$\boldsymbol{d}_{1,2} = \left[1 - \frac{m_1}{m_2} \pm \sqrt{\left(1 - \frac{m_1}{m_2}\right)^2 + 4|g|^2 \frac{m_1}{m_2}} - 2g\sqrt{\frac{m_1}{m_2}}\right]^\top, \qquad g = \frac{c_1 + c_2 e^{\mathrm{i}p}}{c_1 + c_2}.$$
(2.156)

Нормирование векторов  $d_{1,2}$  дает столбцы матрицы P.

Далее формулы (2.155), (2.156) для описания поведения кинетических энергий подрешеток.

#### Колебания кинетической энергии

Рассмотрим колебания кинетической энергии  $T = \frac{1}{2} (T_{11} + T_{22})$  и исследуем

вклад акустических и оптических веток в данные колебания. Колебания вызваны уравниванием кинетической и потенциальной энергий.

В начальный момент времени частицы имеют случайные скорости и нулевые перемещения (2.152). Начальные кинетические энергии подрешеток равны ( $T_{11}^0 = T_{22}^0$ ). Колебания кинетической энергии описываются формулой (2.125). В рассматриваемом случае формула принимает вид:

$$T = \frac{T_0}{2} + T_{ac} + T_{op},$$

$$T_{ac} = \frac{T_0}{8\pi} \int_0^{2\pi} \cos(2\omega_2(p)t) dp, \quad T_{op} = \frac{T_0}{8\pi} \int_0^{2\pi} \cos(2\omega_1(p)t) dp,$$
(2.157)

где  $T_0 = \frac{1}{2} \left( T_{11}^0 + T_{22}^0 \right)$  — начальная кинетическая энергия; дисперсионное соотношение  $\omega_j(p), j = 1, 2$  дано формулой (2.155). Вклады акустических и оптических колебаний даны слагаемыми  $T_{ac}, T_{op}$ . В дальнейшем интегралы в формуле (2.157) вычисляются численно. Интервал интегрирования разбивается на  $10^3$  одинаковых отрезков, на которых подынтегральное выражение считается постоянным.

Для проверки формулы (2.157) проводится сравнение с результатами численного решения уравнений динамики (2.151) с начальными условиями (2.152). В расчетах цепочка состоит из  $5 \cdot 10^5$  частиц при периодических граничных условиях. Численное интегрирование проводится с использованием метода Верле с шагом  $10^{-3}\tau_{min}$ , где  $\tau_{min} = 2\pi/\omega_{max}$ ,  $\omega_{max}$  определена формулой (2.155). В процессе моделирования вычисляется полная кинетическая энергия цепочки. Зависимость энергии от времени для  $m_2/m_1 = 4$  показана на рис. 2.7А. Видно, что аналитическое решение (2.157) совпадает с результатом численного интегрирования уравнений движения.

Рассмотрим вклады веток дисперсионного соотношения  $T_{ac}$ ,  $T_{op}$  в колебания кинетической энергии. Зависимости  $T_{ac}$ ,  $T_{op}$  от времени для  $m_2 = 4m_1$ ,  $c_1 = c_2$  показаны на. 2.7В. Видно, что вклад оптической ветки имеет форму



Рис. 2.7: А. Колебания кинетической энергии цепочки  $(m_2 = 4m_1, c_1 = c_2)$ . Начальные энергии подрешеток равны. Сплошная линия — аналитическое решение (2.157), точки — численное решение. В. Вклады акустических  $(T_{ac}, \text{сплош$  $ная линия})$  и оптических  $(T_{op}, \text{точки})$  веток в колебания кинетической энергии  $(m_2 = 4m_1, c_1 = c_2)$ .

биений, в то время как вклад акустической ветки имеет одну основную частоту. С использованием метода стационарной фазы [47] можно показать, что частоты колебаний энергии принадлежат спектру цепочки. Групповые скорости, соответствующие данным частотам, равны нулю. Рис. 2.6 показывает, что групповая скорость акустических колебаний обращается в ноль при  $p = \pi$ , а оптических — при p = 0 и  $p = \pi$ . Соответствующие частоты имеют вид:

$$\omega_{1}|_{p=0} = \omega_{max}, \qquad \omega_{1}^{2}|_{p=\pi} = \frac{\omega_{max}^{2}}{2} \left( 1 + \sqrt{1 - \frac{16m_{1}m_{2}c_{1}c_{2}}{(m_{1} + m_{2})^{2}(c_{1} + c_{2})^{2}}} \right), \qquad (2.158)$$
$$\omega_{2}^{2}|_{p=\pi} = \frac{\omega_{max}^{2}}{2} \left( 1 - \sqrt{1 - \frac{16m_{1}m_{2}c_{1}c_{2}}{(m_{1} + m_{2})^{2}(c_{1} + c_{2})^{2}}} \right).$$

На больших временах колебания кинетической энергии представляются в виде суммы трех гармоник с частотами (2.158) и амплитудами, затухающими обратно пропорционально  $\sqrt{t}$ . Разница между оптическими частотами  $\omega_1|_{p=0}$  и  $\omega_1|_{p=\pi}$  убывает с увеличением отношения масс, поэтому на рис. 2.7 наблюдаются биения. Аналогичные биения наблюдаются в треугольной решетке [197]. Рассмотрим влияние разницы кинетических энергий подрешеток  $T_{11}^0, T_{22}^0$  на колебания полной кинетической энергии. Колебания для двух случаев  $T_{11}^0 \neq 0, T_{22}^0 = 0$  и  $T_{11}^0 = 0, T_{22}^0 \neq 0$  показаны на рис. 2.8. Видно, что колебания существенно зависят от разности  $T_{11}^0$  и  $T_{22}^0$ . В обоих случаях аналитические результаты (2.125) практически совпадают с результатами численного моделирования.



Рис. 2.8: Влияние начальных энергий подрешеток на колебания полной кинетической энергии ( $m_2 = 4m_1$ ,  $c_1 = c_2$ ). Здесь  $T_{11}^0 \neq 0, T_{22}^0 = 0$  (слева) и  $T_{11}^0 = 0, T_{22}^0 \neq 0$  (справа). Линия — аналитическое решение (2.125), точки — численное решение.

Таким образом, колебания кинетической энергии в точности описываются формулой (2.125). Амплитуда колебаний затухает как  $1/\sqrt{t}$ . Основные частоты колебаний соответствуют нулевым групповым скоростям. Форма колебаний существенно зависит от соотношения между начальными энергиями подрешеток.

### Перераспределение кинетической энергии между подрешетками

Рассмотрим случай, когда начальные энергии подрешеток не равны  $(T_{11}^0 \neq T_{22}^0)$ . Численное решение уравнений движения (2.151) показывает, что разница энергий подрешеток  $T_{11} - T_{22}$  стремится к некотрому равновесному значению. Например, зависимость  $T_{11} - T_{22}$  для  $m_2 = 4m_1$ ,  $c_1 = c_2$  показана на рис. 2.9. Рассматривается два случая:  $T_{11}^0 \neq 0, T_{22}^0 = 0$  и  $T_{11}^0 = 0, T_{22}^0 \neq 0$ . Видно, что в



Рис. 2.9: Разница энергий подрешеток для  $T_{11}^0 \neq 0, T_{22}^0 = 0$  (сплошная линия) и  $T_{11}^0 = 0, T_{22}^0 \neq 0$  (точки). Здесь  $m_2 = 4m_1, c_1 = c_2$ .

обоих случаях разница температур стремится к одному значению  $0.3(T_{11}^0 - T_{22}^0)$ , получающемуся из формулы (2.160). Отметим, что форма кривых для двух случаев заметно отличается. Следовательно, процесс перераспределения энергии зависит от соотношения между начальными энергиями  $T_{11}^0$  и  $T_{22}^0$ .

Вычислим разницу энергий подрешеток в равновесном состоянии, используя формулу (2.148). Девиатор матрицы **T** имеет вид

dev
$$\mathbf{T}_0 = \frac{T_{11}^0 - T_{22}^0}{2} \mathbf{I}, \qquad \mathbf{I} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}.$$
 (2.159)

Подставляя (2.159) в формулу (2.148), получим:

$$\boldsymbol{T}_{eq} = \frac{1}{4} \left( T_{11}^0 + T_{22}^0 \right) \mathbf{E} + \frac{T_{11}^0 - T_{22}^0}{4\pi} \int_0^{2\pi} \boldsymbol{P} \operatorname{diag} \left( \boldsymbol{P}^{*\top} \boldsymbol{I} \boldsymbol{P} \right) \boldsymbol{P}^{*\top} \mathrm{d} \boldsymbol{p}.$$
(2.160)

Здесь матрица **Р** дана формулой (2.156). Формула (2.160) дает равновесные значения энергий подрешеток. Интеграл в формуле (2.160) берется численно

методом прямоугольников. Интервал интегрирования делится на 10<sup>3</sup> равных отрезков.

Рассмотрим случай равных масс  $m_1 = m_2$ . Тогда с использованием формулы (2.156) можно показать, что диагональные элементы матрицы  $P^{*\top}IP$  равны нулю. Тогда из формулы (2.160) следует, что для  $m_1 = m_2$  и любого  $c_1/c_2$ равновесные энергии подрешеток равны.

Для проверки формулы (2.160) проводилось сравнение с результатом численного решения уравнения (2.151) с начальными условиями (2.152). В расчетах цепочки состоят из 10<sup>4</sup> частиц при периодических граничных условиях. Рассматривается следующий диапазон параметров:  $m_1/m_2 \in [0;1]$  и  $c_1/c_2 \in [0;1]$ . Численное интегрирование проводится с шагом  $10^{-3}\tau_*$ , где  $\tau_* = \sqrt{\frac{c_1+c_2}{m_1}}$ . В начальный момент частицы имеют случайные скорости такие, что одна из подрешеток имеет нулевую энергию. В процессе моделирования вычисляются кинетические энергии подрешеток. Равновесные значения вычисляются путем осреднения по временному интервалу  $[t_{max}/4; t_{max}]$ , где  $t_{max}$  — полное время моделирования. Приемлемая точность достигается при  $t_{max} = 10^2 \tau_*$ .

Равновесная разница между энергиями подрешеток показана на рис. 2.10. Видно, что для любого соотношения масс разница энергий уменьшается с уменьшением  $c_1/c_2$  и стремится к некоторому предельному значению, соответствующему случаю  $c_1/c_2 \rightarrow 0$ . В частности, результаты для  $c_2 = 64c_1$  и  $c_2 = 32c_1$ практически неразличимы.

Таким образом, для рассматриваемой системы равновесные значения энергий подрешеток равны, если либо равны начальные энергии  $T_{11}^0 = T_{22}^0$  либо равны массы частиц  $m_1 = m_2$ , а жесткости — произвольные. В общем случае кинетические энергии подрешеток не равны. Их значения в точности предсказываются формулами (2.160).



Рис. 2.10: Разница равновесных значений энергий подрешеток в двухатомной цепочке. Здесь  $T_{11}^0, T_{22}^0$  — начальные энергии подрешеток. Линии — расчеты по формуле (2.160) при  $\frac{c_1}{c_2} = 1$  (сплошная);  $\frac{1}{2}$  (точки);  $\frac{1}{4}$  (короткий пунктир);  $\frac{1}{8}$  (пунктир);  $\frac{1}{16}$  (штрих-пунктир);  $\frac{1}{32}$  (штрих-пунктир с двумя точками). Круги — результаты численного интегрирования уравнений динамики (2.151).

### 2.3.7.2 Пример. Поперечные колебания решетки графена

## Уравнения динамики

Рассмотрим поперечные колебания растянутого графенового листа (см. рис. 2.11). Колебания в плоскости листа могут рассматриваться независимо, т.к. в линейном приближении поперечные колебания и колебания в плоскости независимы. Элементарные ячейки, содержащие по две частицы, нумеруются парой индексов *i*, *j* (см. рис.2.11). Базисные векторы **b**<sub>1</sub> и **b**<sub>2</sub> имеют вид:

$$\mathbf{b}_1 = \frac{\sqrt{3}a}{2} \left( \mathbf{i} + \sqrt{3}\mathbf{j} \right), \qquad \mathbf{b}_2 = \frac{\sqrt{3}a}{2} \left( \sqrt{3}\mathbf{j} - \mathbf{i} \right), \qquad (2.161)$$

где  $\mathbf{i}, \mathbf{j}$  — векторы декартова базиса, соответствующие осям x и y соответственно (см. 2.11). Положения элементарных ячеек представляются через базисные векторы следующим образом:  $\mathbf{x}_{i,j} = i\mathbf{b}_1 + j\mathbf{b}_2$ .

Каждая частица имеет одну степень свободы. Перемещения частиц элемен-



Рис. 2.11: Нумерация элементарных ячеек в графене. Подрешетки помечены разными цветами. Здесь  $\mathbf{b}_1$ ,  $\mathbf{b}_2$  — базисные векторы решетки. Частицы движутся вдоль нормали к плоскости рисунка.

тарной ячейки *i*, *j* формируют столбец:

$$\mathbf{u}_{i,j} = \mathbf{u}(\mathbf{x}_{i,j}) = \begin{bmatrix} u_{i,j}^1 & u_{i,j}^2 \end{bmatrix}^\top, \qquad (2.162)$$

где  $u_{i,j}^1, u_{i,j}^2$  — перемещения частиц двух подрешеток.

Рассмотрим уравнение движения ячейки *i*, *j*. Каждая частица соединена с тремя соседями линейными пружинками (сплошные линии на рис. 2.11). Равновесная длина пружинки меньше, чем начальное расстояние между частицами, следовательно лист графена равномерно растянут. Тогда уравнения движения имеют вид:

$$\boldsymbol{M}\ddot{\mathbf{u}}_{i,j} = \boldsymbol{C}_{1}\mathbf{u}_{i+1,j} + \boldsymbol{C}_{-1}\mathbf{u}_{i-1,j} + \boldsymbol{C}_{0}\mathbf{u}_{i,j} + \boldsymbol{C}_{2}\mathbf{u}_{i,j+1} + \boldsymbol{C}_{-2}\mathbf{u}_{i,j-1},$$
$$\boldsymbol{M} = \begin{bmatrix} m & 0 \\ 0 & m \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{C}_{0} = \begin{bmatrix} -3c & c \\ c & -3c \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{C}_{1} = \boldsymbol{C}_{2} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ c & 0 \end{bmatrix}.$$
(2.163)

Здесь  $C_{-1} = C_1^{\top}, C_{-2} = C_2^{\top}; m$  — масса частицы; c — жесткость, зависящая от начального натяжения.

В начальный момент времени частицы имеют случайные скорости и нулевые

перемещения:

$$u_{i,j}^1 = u_{i,j}^2 = 0, \quad \dot{u}_{i,j}^1 = \beta_{i,j} \sqrt{\frac{2}{m} T_{11}^0}, \quad \dot{u}_{i,j}^2 = \gamma_{i,j} \sqrt{\frac{2}{m} T_{22}^0},$$
 (2.164)

где  $T_{11}^0, T_{22}^0$  — энергии подрешеток, независящие от  $i, j; \beta_{i,j}, \gamma_{i,j}$  — некоррелированные случайные числа с нулевым математическим ожиданием и единичной дисперсией, т.е.  $\left<\beta_{i,j}\right> = \left<\gamma_{i,j}\right> = 0, \left<\beta_{i,j}^2\right> = \left<\gamma_{i,j}^2\right> = 1, \left<\beta_{i,j}\gamma_{s,p}\right> = 0$ для всех i, j, s, p. Начальная матрица  $T_0$ , соответствующая начальным условиям (2.164), имеет вид:

$$\boldsymbol{T}_{0} = \begin{bmatrix} T_{11}^{0} & 0\\ 0 & T_{22}^{0} \end{bmatrix}, \qquad 2T_{11}^{0} = m \left\langle \left( \dot{u}_{i,j}^{1} \right)^{2} \right\rangle, \qquad 2T_{22}^{0} = m \left\langle \left( \dot{u}_{i,j}^{2} \right)^{2} \right\rangle. \tag{2.165}$$

Здесь скорости вычислены при t = 0. Далее рассматривается поведение энергий подрешеток  $T_{11}, T_{22}$ .

#### Дисперсионное соотношение

Вычислим дисперсионное соотношение для рассматриваемой модели графена. Динамическая матрица  $\Omega$  вычисляется по формуле (2.118). Подставляя формулы (2.163) для матриц  $C_{\alpha}$ ,  $\alpha = 0; \pm 1; \pm 2$  в формулу (2.118), получим:

$$\boldsymbol{\Omega} = \omega_*^2 \begin{bmatrix} 3 & -1 - e^{-ip_1} - e^{-ip_2} \\ -1 - e^{ip_1} - e^{ip_2} & 3 \end{bmatrix}, \qquad p_1 = \mathbf{k} \cdot \mathbf{b}_1, \quad p_2 = \mathbf{k} \cdot \mathbf{b}_2,$$
(2.166)

где  $\mathbf{k}$  — волновой вектор;  $\omega_*^2 = \frac{c}{m}$ ;  $p_1, p_2 \in [0; 2\pi]$  — безразмерные компоненты волнового вектора.

Собственные числа  $\omega_1^2, \omega_2^2$  матрицы  $\boldsymbol{\Omega}$  дают дисперсионное соотношение:

$$\omega_{1,2}^2 = \omega_*^2 \left( 3 \pm \sqrt{3 + 2\left(\cos p_1 + \cos p_2 + \cos\left(p_1 - p_2\right)\right)} \right), \qquad (2.167)$$

где индекс 1 соответствует знаку плюс. Функции  $\omega_1(p_1, p_2), \omega_2(p_1, p_2)$  называются оптической и акустической дисперсионными поверхностями (см. рис. 2.12). Собственные векторы матрицы **П** дают столбцы матрицы **P**:



Рис. 2.12: Акустическая ( $\omega_2(p_1, p_2)/\omega_*$ , слева) и оптическая ( $\omega_1(p_1, p_2)/\omega_*$ , справа) дисперсионные поверхности (2.167) для графена.

$$\boldsymbol{P} = \frac{1}{\sqrt{|g|^2 + g^2}} \begin{bmatrix} |g| & |g| \\ -g & g \end{bmatrix}, \qquad g = 1 + e^{ip_1} + e^{ip_2}. \tag{2.168}$$

Далее формулы (2.166), (2.167), (2.168) используются для описания переходных процессов в графене.

### Колебания кинетической энергии

Рассмотрим колебания величины  $T = \frac{1}{2}(T_{11} + T_{22})$ , пропорциональной полной кинетической энергии графена.

В общем случае колебания описываются формулой (2.124). Используя формулы (2.165), (2.168), можно показать, что диагональные элементы матрицы  $P^{*\top} \text{dev} T_0 P$  равны нулю. Тогда из формулы (2.124) следует, что колебания кинетической энергии не зависят от соотношения между энергиями подрешеток  $T_{11}^0$  и  $T_{22}^0$ . Для описания этих колебаний может использоваться формула (2.125):

$$T = \frac{T_0}{2} + T_{ac} + T_{op}, \qquad T_{ac} = \frac{T_0}{16\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \cos(2\omega_2(p_1, p_2)t) dp_1 dp_2,$$
  
$$T_{op} = \frac{T_0}{16\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \cos(2\omega_1(p_1, p_2)t) dp_1 dp_2,$$
  
(2.169)

где  $T_0 = \frac{1}{2} \left( T_{11}^0 + T_{22}^0 \right)$  — начальная кинетическая энергия; функции  $\omega_{1,2}(p_1, p_2)$  определены формулой (2.167). В дальнейшем интегралы в формуле (2.169) вычисляются через сумму Римана. Область интегрирования при этом разбивается на 400 × 400 одинаковых квадратов.

Для проверки формулы (2.169) проведем сравнение результатов с численным решением уравнений динамики (2.163) с начальными условиями (2.164). В расчетах лист графена содержит  $10^3 \times 10^3$  элементарных ячеек при периодических граничных условиях. Численное интегрирование проводится методом Верле с шагом  $5 \cdot 10^{-3} \tau_*$ , где  $\tau_* = 2\pi/\omega_*$ . В процессе моделирования вычисляется полная кинетическая энергия системы. В таком случае осреднение по реализациям не требуется. Поведение кинетической энергии показано на рис. 2.13А. Рисунок показывает, что формула (2.169) в точности описывает колебания кинетической энергии. Вычисления с разными начальными энергиями подрешеток ( $T_{11}^0 \neq T_{22}^0$ ) подтверждают наше заключение о том, что отношение данных энергий не влияет по поведение T.

Вклад двух дисперсионных поверхностей в колебания кинетической энергии показан на рис. 2.13В. Вклады даны интегралами  $T_{ac}$  и  $T_{op}$  (см. формулу (2.169)). Видно, что колебания, соответствующие вкладу оптической поверхности, имеют две основные частоты, в то время как колебания, соответствующие вкладу акустической поверхности, имеют только одну частоту. Данные частоты могут быть определены с использованием асимптотического анализа интегралов (2.169) на больших временах t с использованием метода стационарной фазы [47]. Такое исследование выходит за рамки данной работы.



Рис. 2.13: А. Колебания кинетической энергии в листе графена. Точки — численное решение уравнений движения (2.163), линия — аналитическое решение (2.169). В. Вклад акустических ( $T_{ac}$ , сплошная линия) и оптических ( $T_{op}$ , точки) дисперсионных поверхностей в колебания кинетической энергии в графене.

Таким образом, колебания кинетической энергии в точности описываются формулой (2.169). Амплитуда данных колебаний затухает как 1/t. Формула (2.169) справедлива при произвольном соотношении энергий подрешеток.

### Перераспределение энергии между подрешетками

Рассмотрим поведение энергий подрешеток в случае  $T_{11}^0 \neq T_{22}^0$ . Равновесные значения энергий подрешеток вычисляются с использованием формулы (2.148). Соответствующие выражения для начальной матрицы T даны формулой (2.165). Матрица  $P^{*\top} \text{dev} T_0 P$  в формуле (2.148) имеет нулевые диагональные элементы. Тогда из формулы (2.148) следует, что  $\text{dev} T_{eq} = 0$ , т.е. энергии подрешеток со временем уравниваются.

Для проверки данного факта проводилось численное решение уравнений движения (2.163) с начальными условиями (2.164). Рассматривалась ячейка периодичности, содержащая  $10^3 \times 10^3$  элементарных ячеек. В начальный момент времени частицы одной подрешетки имеют случайные скорости, а второй неподвижны. Начальные перемещения равны нулю. Численное интегрирование проводится с шагом 5 ·  $10^{-3}\tau_*$ , где  $\tau_* = 2\pi/\omega_*$ . Зависимость разности энергий  $T_{11} - T_{22}$  от времени приведена на рис. 2.14. Видно, что разница энергий



Рис. 2.14: Перераспределение энергии между подрешетками в графене (численное решение уравнений движения (2.163)).

совершает колебания, похожие на биения. Амплитуда биений затухает как 1/t.

Таким образом, на больших временах энергии подрешеток в графене уравниваются даже в гармоническом приближении. Обычно для уравнивания необходимо наличие нелинейности [246].

### 2.3.7.3 Пример. Треугольная решетка (колебания в плоскости)

### Общие соотношения

Рассмотрим переходные процессы в двумерной треугольной решетке. Ограничимся рассмотрением случая, когда взаимодействуют только ближайшие соседи.

Линеаризованное уравнение движения частицы треугольной решетки с радиус-вектором **x** имеет вид:

$$M\dot{\mathbf{v}}(\mathbf{x}) = \sum_{\alpha} c_{\alpha} \mathbf{e}_{\alpha} \mathbf{e}_{\alpha} \cdot \left( \mathbf{u}(\mathbf{x} + \mathbf{a}_{\alpha}) - 2\mathbf{u}(\mathbf{x}) + \mathbf{u}(\mathbf{x} - \mathbf{a}_{\alpha}) \right), \qquad (2.170)$$

где  $\mathbf{v}(\mathbf{x})$  — скорость частицы с радиус-вектором  $\mathbf{x}$ ;  $\mathbf{e}_{\alpha} = \mathbf{a}_{\alpha}/|\mathbf{a}_{\alpha}|$ ; M — масса частицы. Суммирование ведется по неколлинеарным направлениям связей  $\alpha$  =

### 1, 2, 3.

### Дисперсионное соотношение

Определим дисперсионное соотношение для треугольной решетки. Построение дисперсионного соотношения сводится к поиску собственных чисел динамической матрицы **Ω**, которая имеет вид:

$$\mathbf{\Omega} = \omega_*^2 \begin{bmatrix} 4\sin^2\theta_s - \sin^2\theta_p + \sin^2(\theta_s + \theta_p) & -\sqrt{3}\left(\sin^2\theta_p - \sin^2(\theta_s + \theta_p)\right) \\ -\sqrt{3}\left(\sin^2\theta_p - \sin^2(\theta_s + \theta_p)\right) & 3\left(\sin^2\theta_p + \sin^2(\theta_s + \theta_p)\right) \end{bmatrix}.$$
(2.171)

Тогда дисперсионное соотношение определяется решением уравнения:

$$\omega^4 - 4\omega_*^2 \omega^2 \left(\sin^2 \theta_s + \sin^2 \theta_p + \sin^2 (\theta_s + \theta_p)\right) + 12\omega_*^4 \left(\sin^2 \theta_s \sin^2 \theta_p + \sin^2 (\theta_s + \theta_p)(\sin^2 \theta_s + \sin^2 \theta_p)\right) = 0.$$
(2.172)

Две дисперсионные поверхности, рассчитанные на основе формулы (2.172), приведены на рис. 2.15. Далее дисперсионное соотношение будет использоваться



Рис. 2.15: Дисперсионные поверхности для двумерной треугольной решетки. Частота нормирована на  $\omega_*$ .

для описания колебаний кинетической энергии.

### Одно решение уравнений динамики

В настоящем параграфе приведено решение вспомогательной задачи динамики для треугольной решетки. Решение необходимо для того, чтобы продемонстрировать аналогию между колебаниями энергий и колебаниями частиц решетки.

Рассмотрим треугольную решетку, состоящую из частиц массы M, соединенных пружинками жесткости 4C. Будем использовать периодические граничные условия. Ячейка периодичности имеет форму ромба со стороной, состоящей из 2N + 1 частиц. Уравнения движения имеют вид

$$\ddot{\mathbf{u}}_{k,n} = 4\omega_*^2 \left( \mathbf{e}_1 \mathbf{e}_1 \cdot \left( \mathbf{u}_{k+1,n} - 2\mathbf{u}_{k,n} + \mathbf{u}_{k-1,n} \right) + \mathbf{e}_2 \mathbf{e}_2 \cdot \left( \mathbf{u}_{k,n+1} - 2\mathbf{u}_{k,n} + \mathbf{u}_{k,n-1} \right) + \mathbf{e}_3 \mathbf{e}_3 \cdot \left( \mathbf{u}_{k+1,n+1} - 2\mathbf{u}_{k,n} + \mathbf{u}_{k-1,n-1} \right) \right).$$
(2.173)

Пусть в начальный момент времени центральная частица (k = 0, n = 0) смещена вдоль связи  $\mathbf{e}_1$  на  $u_0$ . Начальные скорости и перемещения остальных частиц равны нолю.

Введем новые переменные:

$$\mathbf{u}_{k,n} = w_1 \mathbf{e}_1 + w_2 \mathbf{e}_2, \qquad w_1 = \frac{2}{3} (2u_1 + u_2),$$

$$w_2 = \frac{2}{3} (2u_2 + u_1), \qquad u_i = \mathbf{u}_{k,n} \cdot \mathbf{e}_i.$$
(2.174)

Здесь и далее индексы k, n у величин  $w_1, w_2, u_1, u_2$  для краткости опущены. С учетом (2.174) уравнения движения принимают вид

$$\ddot{w}_{1} = 2\omega_{*}^{2} \left( \Delta_{1}^{2} (2w_{1} - w_{2}) + \Delta_{3}^{2} (w_{1} + w_{2}) \right),$$

$$\ddot{w}_{2} = 2\omega_{*}^{2} \left( \Delta_{2}^{2} (2w_{2} - w_{1}) + \Delta_{3}^{2} (w_{1} + w_{2}) \right).$$
(2.175)

Данные уравнения решаются с начальными условиями

$$\mathbf{u}_{k,n} = u_0 \delta_k \delta_n \mathbf{e}_1, \quad w_1 = u_0 \delta_k \delta_n, \quad w_2 = 0; \quad \dot{w}_1 = \dot{w}_2 = 0.$$
 (2.176)

Применим дискретное преобразование Фурье по индексам k, n к уравнениям (2.175). Для этого воспользуемся тождествами

$$\Phi\left(\Delta_1^2 g_{k,n}\right) = -4\sin^2\theta_s \hat{g}_{s,p}, \qquad \Phi\left(\Delta_2^2 g_{k,n}\right) = -4\sin^2\theta_p \hat{g}_{s,p},$$

$$\Phi\left(\Delta_3^2 g_{k,n}\right) = -4\sin^2(\theta_s + \theta_p)\hat{g}_{s,p}, \qquad \theta_s = \frac{\pi s}{2N+1}.$$

$$(2.177)$$

В результате для Фурье-образов  $\hat{w}_i = \Phi(w_i)$  имеем

$$\ddot{\hat{w}}_{1} = -8\omega_{*}^{2} \left[ (2\sin^{2}\theta_{s} + \sin^{2}(\theta_{s} + \theta_{p}))\hat{w}_{1} + (\sin^{2}(\theta_{s} + \theta_{p}) - \sin^{2}\theta_{s})\hat{w}_{2} \right],$$

$$\ddot{\hat{w}}_{2} = -8\omega_{*}^{2} \left[ (\sin^{2}(\theta_{s} + \theta_{p}) - \sin^{2}\theta_{p})\hat{w}_{1} + (2\sin^{2}\theta_{p} + \sin^{2}(\theta_{s} + \theta_{p}))\hat{w}_{2} \right].$$
(2.178)

Собственные частоты  $\Omega_1$ ,  $\Omega_2$ , соответствующие системе (2.178), определяются уравнением

$$\Omega_j^4 - 16\omega_*^2 \Omega_j^2 (\sin^2 \theta_s + \sin^2 \theta_p + \sin^2 (\theta_s + \theta_p)) + 192\omega_*^4 (\sin^2 (\theta_s + \theta_p) \sin^2 \theta_s + \sin^2 (\theta_s + \theta_p) \sin^2 \theta_p + \sin^2 \theta_s \sin^2 \theta_p) = 0, \qquad j = 1, 2.$$

$$(2.179)$$

Начальные условия для Фурье-образов  $\hat{w}_1, \hat{w}_2$  имеют вид:

$$\hat{w}_1 = u_0, \quad \hat{w}_2 = 0, \quad \dot{\hat{w}}_1 = \dot{\hat{w}}_2 = 0.$$
 (2.180)

Решая систему (2.178) с начальными условиями (2.180) и применяя обратное

преобразование Фурье, получим

$$\mathbf{u}_{k,n} = w_1 \mathbf{e}_1 + w_2 \mathbf{e}_2,$$

$$w_{1} = \frac{u_{0}}{2(2N+1)^{2}} \sum_{s,p=-N}^{N} \cos(2\theta_{s}k + 2\theta_{p}n) \Big( \cos(\Omega_{1}t) + \cos(\Omega_{2}t) + \\ + 16\omega_{*}^{2} \frac{\sin^{2}\theta_{s} - \sin^{2}\theta_{p}}{\Omega_{1}^{2} - \Omega_{2}^{2}} \Big( \cos(\Omega_{1}t) - \cos(\Omega_{2}t) \Big) \Big),$$

$$w_{2} = \frac{8u_{0}}{(2N+1)^{2}} \sum_{s,p=-N}^{N} \frac{\omega_{*}^{2} (\sin^{2}(\theta_{s} + \theta_{p}) - \sin^{2}\theta_{p})}{\Omega_{1}^{2} - \Omega_{2}^{2}} \Big( \cos(\Omega_{1}t) - \\ \cos(\Omega_{2}t) \Big) \cos(2\theta_{s}k + 2\theta_{p}n).$$
(2.181)

Формулы (2.181) дают точное решение задачи о колебаниях треугольной решетки, в которой одна из частиц имеет начальное смещение.

Анализ решения (2.181) показывает, что колебания центральной частицы k = 0, n = 0 (частицы, которой изначально было задано смещение) описывается той же функцией, что и колебания кинетической энергии решетки со случайными скоростями. Подобная аналогия между процессом колебаний энергий и колебаниями самого кристалла впервые была отмечена в работе [240], где рассматривалась одномерная гармоническая цепочка.

#### Выравнивание кинетической и потенциальной энергий

Рассмотрим процесс выравнивания кинетической и потенциальной энергий. Поведение кинетической энергии в процессе выравнивания описывается формулой:

$$T = \frac{T_0}{2} + \frac{T_0}{4\pi^2} (I_1 + I_2), \quad I_j = \int_0^\pi \int_0^\pi \cos\left(2\omega_j(p,s)t\right) dp ds, \quad (2.182)$$

где  $\omega_1, \omega_2$  — дисперсионные поверхности (2.172).

Для проверки формулы (2.182) проводилось численное решение уравнений динамики решетки. Для численного интегрирования использовался метод Вер-



Рис. 2.16: Выравнивание кинетической и потенциальной энергий в гармонической треугольной решетке со случайными начальными скоростями: линия аналитическое решение; кружок — численное решение уравнений динамики.

ле с шагом интегрирования  $\tau = 10^{-3}\tau_*$ . На рис. 2.16 представлен процесс выравнивания кинетической и потенциальной энергий. Видим, что аналитическое решение (2.182) в масштабе рисунка неотличимо от результатов численного решения уравнений динамики решетки.

Анализ формулы (2.182) показывает, что отклонение кинетической энергии от среднего значения совершает затухающие колебания с амплитудой, обратно пропорциональной времени. За время порядка 10 $\tau_*$  отклонение уменьшается на два порядка.

Колебания кинетической энергии на больших временах определяются асимптотическим поведением интегралов  $I_j$  при  $t \to \infty$ . В работе [197] показано, что колебания имеют три основных частоты:

$$\Omega_1 = \frac{9}{2}\omega_*, \qquad \Omega_2 = 2\sqrt{6}\omega_*, \qquad \Omega_3 = 2\sqrt{2}\omega_*.$$
(2.183)

Первые две частоты получаются из асимптотики интеграла  $I_1$ , последняя — из интеграла  $I_2$ . Заметим, что частоты  $\Omega_1$  и  $\Omega_2$  близки, что приводит к возникновению биений (см. рис. 2.17). Асимптотическая формула для температуры на


Рис. 2.17: Колебания кинетической энергии в гармонической треугольной решетке со случайными начальными скоростями: пунктир — точная формула; сплошная линия — асимптотическая формула (2.184).

больших временах имеет вид:

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

$$(2.184)$$

Для проверки формулы (2.184) проведем сравнение с точным решением (2.182). Соответствующие зависимости температуры от времени показаны на рис. 2.17. Видно, что асимптотическая формула (2.184) быстро сходится к точному решению и может быть использована для расчетов, уже начиная с времен  $t \sim \tau_*$ .

#### Вычисление ковариации перемещений в задачах о тепловом расширении

В работах [243, 256] показано, что ковариация перемещений играет важную роль при описании теплового расширения кристаллов. В частности, коэффициент теплового расширения для треугольной решетки существенно зависит от соотношения между компонентами следующего тензора в стационарном состоянии:

$$\mathbf{A} = \left\langle \left( \mathbf{u}(\mathbf{r} + \mathbf{a}_{\alpha}) - \mathbf{u}(\mathbf{r}) \right) \left( \mathbf{u}(\mathbf{r} + \mathbf{a}_{\alpha}) - \mathbf{u}(\mathbf{r}) \right) \right\rangle =$$

$$= \frac{1}{m} \left( 2\mathbf{U}(0) - \mathbf{U}(\mathbf{a}_{\alpha}) - \mathbf{U}(-\mathbf{a}_{\alpha}) \right), \qquad \mathbf{U}(\mathbf{r}_{1} - \mathbf{r}_{2}) = \left\langle \mathbf{u}(\mathbf{r}_{1})\mathbf{u}(\mathbf{r}_{2}) \right\rangle.$$
(2.185)

Без потери общности будем рассматривать случай  $\alpha = 1$ . Тогда компоненты  $A_{xx} = \mathbf{i} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{i}$  и  $A_{yy} = \mathbf{j} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{j}$  тензора  $\mathbf{A}$  в декартовом базисе характеризуют продольные и поперечные деформации связи, вызванные тепловым движением частиц. В работе [256] показано, что коэффициент теплового расширения треугольной решетки зависит от отношения  $A_{yy}/A_{xx}$ .

Вычислим тензор **A** в рамках рассматриваемой модели гармонического кристалла. Для этого определим ковариацию перемещений на основе численного решения системы уравнений (2.129). Как и ранее, уравнения решаются для ячейки периодичности в форме ромба. Используются следующие начальные условия:

$$\boldsymbol{U} = 0, \qquad \dot{\boldsymbol{U}} = 0, \qquad \boldsymbol{K} = \boldsymbol{K}_0 \delta_k \delta_n \mathbf{E}, \qquad \dot{\boldsymbol{K}} = 0.$$
 (2.186)

При этом значение  $K_0$  не влияет на отношение  $A_{yy}/A_{xx}$ . Для численного решения уравнений (2.129) используется алгоритм Верле с шагом по времени  $10^{-3}\tau_*$ . В результате решения получаются следующее соотношение между компонентами тензора **A**:

$$\frac{A_{yy}}{A_{xx}} \approx 1.43. \tag{2.187}$$

Формула (2.187) хорошо согласуется с результатами молекулярно-динамического моделирования, проведенного для кристалла Леннарда-Джонса в [256], где было получено  $A_{yy}/A_{xx} \approx 1.435$ .

Таким образом, подход, рассмотренный в данном параграфе, может использоваться в том числе и при описании теплового расширения кристаллов. Более подробно вопрос определения коэффициента теплового расширения кристаллов рассматривается в главе 4.

#### 2.3.8 О влиянии нелинейности на переходные процессы

В данном параграфе численно исследуется влияние малой нелинейности на два быстрых переходных процесса: выравнивание кинетической и потенциальной энергий и перераспределение энергии по пространственным направлениям.

Рассмотрим треугольную решетку, частицы в которой взаимодействуют посредством потенциала Леннарда-Джонса:

$$\Pi(r) = \varepsilon \left[ \left(\frac{a}{r}\right)^{12} - 2\left(\frac{a}{r}\right)^6 \right], \qquad (2.188)$$

где  $\varepsilon$  — энергия связи; a — равновесное расстояние. Учитываются только взаимодействия ближайших соседей. Моделирование проводится при периодических граничных условиях. В начальный момент времени частицам сообщаются независимые случайные скорости, равномерно распределенные в круге радиуса  $v_0$ . В качестве масштаба скорости используется скорость диссоциации  $v_d = \sqrt{2\varepsilon/m}$ . Начальные перемещения частиц равны нолю.

Варьируя амплитуду начальных скоростей частиц (температуру), можно изменять степень влияния нелинейности на поведение системы. Покажем, что при малых скоростях частиц (низких температурах) переходные процессы в кристалле Леннарда-Джонса хорошо описываются гармонической моделью.

Рассмотрим сначала влияние нелинейности на выравнивание кинетической и потенциальной энергий. Зависимость лагранжиана от времени, полученная в результате молекулярно-динамического моделирования, представлена на рис. 2.18. Видим, что при переходе к стационарному состоянию кинетическая и потенциальная энергии выравниваются. При  $v_0 = 0,05v_d$  зависимость L(t)в рассматриваемом временном интервале в пределах толщины линии совпадает с аналитическим решением для гармонического кристалла. При увеличении амплитуды начальных скоростей частиц влияние нелинейности приводит к то-



Рис. 2.18: Выравнивание лагранжиана в треугольной решетке с взаимодействиями Леннарда-Джонса (частицы имеют случайные скорости, равномерно распределенные в круге радиуса  $v_0$ : сплошная линия —  $v_0/v_d = 0,05$ ; точка —  $v_0/v_d = 0,25$ ; пунктирная линия —  $v_0/v_d = 0,5$ .

му, что кинетическая и потенциальная энергии выравниваются быстрее, чем в гармоническом кристалле.

Исследуем влияние нелинейности на процесс перераспределения энергии по направлениям. Пусть начальные скорости частиц направлены вдоль оси x, параллельной одному из базисных векторов решетки. В ходе молекулярно-динамического моделирования вычислялась разность кинетический энергий  $T_{xx}$ ,  $T_{yy}$ , соответствующих направлениям x и y. Зависимость  $T_{xx} - T_{yy}$  от времени представлена на рис. 2.19. Кривые соответствуют среднему значению по 25 реализациям с различными случайными начальными скоростями. Видим, что при переходе к стационарному состоянию разность  $T_{xx} - T_{yy}$  в течение одного периода  $\tau_*$  уменьшается примерно в четыре раза, затем медленно стремится к нолю.

Таким образом, при малой нелинейности и на не слишком больших временах поведение кристалла хорошо описывается гармонической моделью. Наличие нелинейности приводит к ускорению переходных процессов. Кинетическая и потенциальная энергии в нелинейном кристалле выравниваются быст-



Рис. 2.19: Перераспределение энергии по пространственным направлениям в треугольной решетке с взаимодействиями Леннарда-Джонса (частицы имеют случайные скорости, равномерно распределенные в круге радиуса  $v_0$ : точка —  $v_0/v_d = 0,05$ ; пунктирная линия —  $v_0/v_d = 0,25$ ; штрих-пунктирная линия —  $v_0/v_d = 0,5$ ; штрих-пунктирная линия с двумя точками — аналитическое решение стационарной задачи для гармонического кристалла; сплошная линия — численное решение уравнений динамики решетки.

рее, чем в гармоническом. Кроме того, наличие нелинейности приводит к появлению дополнительного медленного эволюционного процесса, в результате которого кинетические энергии, соответствующие различным степеням свободы, выравниваются. Скорость эволюционного процесса зависит от степени нелинейности (температуры).

#### 2.3.9 Результаты параграфа 2.3

В настоящем параграфе подход к описанию переходных процессов в деформируемых твердых телах обобщен на случай идеальных кристаллов со сложной решеткой, элементарная ячейка которой содержит произвольное число частиц с произвольным числом степеней свободы. Уравнения динамики решетки записаны в общем матричном виде, что позволяет с единых позиций рассматривать широкий класс решеток с взаимодействием произвольного числа соседей. Построено уравнение для определения дисперсионного соотношения. Рассмотрены переходные процессы в кристалле со случайными начальными скоростями и нулевыми перемещениями. Введены ковариации скоростей частиц, находящихся в двух элементарных ячейках. В рассмотренном случае ковариации задаются квадратными матрицами с размерностью, равной числу степеней свободы элементарной ячейки. Получены уравнения, описывающие динамику ковариаций. Начальные условия к данным уравнениям являются детерминированными. Уравнения описывают, в частности, два переходных процесса: колебания кинетической энергии системы, связанные с выравниванием кинетической и потенциальной энергий и перераспределением кинетической энергии по степеням свободы элементарной ячейки.

Показано, что для описания колебаний кинетической энергии достаточно рассмотрения ковариации скоростей. Получено точное решение уравнения для ковариаций скоростей. Выведена формула (2.122), описывающая колебания кинетической энергии в случае произвольного начального распределения кинетической энергии между подрешетками.

Для описания процесса перераспределения энергии по степеням свободы элементарной ячейки введены обобщенная кинетическая и потенциальная энергии, а также обобщенный гамильтониан системы. Показано, что для обобщенного гамильтониана выполняется ряд законов сохранения. В частности, сохраняется его след. Данный факт позволяет записать уравнение для девиатора обобщенного гамильтониана, описывающее процесс перераспределения энергии по степеням свободы элементарной ячейки. Получено точное решение данного уравнения для случая, когда частицы имеют случайные скорости и нулевые перемещения.

После затухания переходных процессов система переходит в практически стационарное состояние, определяемое как состояние, в котором вторые производные ковариаций равны нулю. Показано, что в стационарном состоянии обобщенные кинетическая и потенциальная энергии равны. С использованием законов сохранения для обобщенного гамильтониана и уравнений динамики получена система уравнений (2.138), связывающих значения обобщенных энергий в стационарном состоянии с начальными условиями. Показано, в частности, что на стационарное состояние оказывает влияние только начальное значение гамильтониана и не влияют его производные. Получено общее решение (2.147) системы уравнения (2.138). Данное решение можно рассматривать в качестве замены теоремы о равном распределении для гармонических кристаллов.

В качестве примера рассмотрены переход к равновесию для двух систем со сложной решеткой: цепочка с чередующимися массами и жесткостями и решетка графена, совершающая только поперечные колебания.

Для цепочки с чередующимися массами и жесткостями на основе общего решения (2.122) построена зависимость кинетической энергии от времени. Показано, что при переходе к равновесию кинетическая энергия совершает колебания около равновесного значения, равного половине начальной энергии. Отклонение от стационарного значения совершает затухающие колебания с амплитудой, обратно пропорциональной корню из времени. Проведено сравнение с численным решением уравнений динамики решетки. Показано, что аналитические и численные результаты практически совпадают. Рассмотрены начальные условия, при которых подрешетки имеют случайные скорости, соответствующие различным начальным энергиям, и нулевые перемещения. На основе формулы (2.147) построена зависимость разности энергий подрешеток в стационарном состоянии от соотношения масс и жесткостей. Показано, что в случае, если частицы имеют одинаковые массы, в стационарном состоянии для системы выполняется теорема о равном распределении для произвольного соотношения между жесткостями пружинок. Если массы подрешеток различны, теорема о равном распределении не выполняется. Отношение разности энергий в стационарном состоянии к начальной разности температур монотонно меняется в интервале от  $\frac{1}{2}$  (при массе одной из подрешеток, стремящейся к нулю) до 0 (когда массы подрешеток равны).

Рассмотрена простейшая модель графенового листа, совершающего попе-

речные колебания. На основе общего решения (2.122) построена зависимость кинетической энергии от времени. Показано, что при переходе к равновесию кинетическая энергия совершает колебания около равновесного значения, равного половине начальной энергии. Отклонение от стационарного значения совершает затухающие колебания с амплитудой, обратно пропорциональной времени. Проведено сравнение с численным решением уравнений динамики решетки. Показано, что аналитические и численные результаты практически совпадают. Рассмотрены начальные условия, при которых подрешетки имеют случайные скорости, соответствующие различным начальным энергиям, и нулевые перемещения. На основе общей формулы (2.147) показано, что в стационарном состоянии для рассматриваемой модели графена выполняется теорема о равном распределении. Для проверки данного факта проведено численное решение уравнений динамики решетки. Показано, что разность энергий подрешеток совершает затухающие колебания.

Численно исследовано влияние нелинейности. Показано, что малая нелинейность приводит к тому, что на быстрые процессы накладывается медленный процесс, вызванный наличием нелинейности. Таким образом, полученные результаты можно применять в том числе и для описания быстрых переходных процессов в слабо нелинейных системах на малых временах.

Результаты, полученные в данном параграфе, опубликованы в работах [9, 115, 116, 197, 245, 246].

#### 2.4 Заключение к главе 2

В главе развит подход к аналитическому описанию переходных процессов в деформируемых твердых телах с кристаллической структурой. Рассмотрены кристаллы с различными видами решетки. Начальные условия для уравнений динамики решетки — стохастические, т.е. скорости и перемещения частиц являются случайными величинами. Подход основан на введении ковариаций пере-

мещений и скоростей частиц. В простейшем случае скалярных решеток данные величины — скаляры, а в случае сложных решеток — квадратные матрицы с размерностью, равной числу степеней свободы в элементарной ячейке. Получены уравнения, описывающие изменение ковариаций во времени. Начальные условия для ковариаций — детерминированные. Решение уравнения для ковариаций позволяет, в частности, описать два переходных процесса: выравнивание кинетической и потенциальной энергий и перераспределение энергии по степеням свободы элементарной ячейки (в случае, если ячейка имеет несколько степеней свободы). Получены точные решения уравнений динамики ковариаций, которые описывают данные переходные процессы. Показано, что система стремится к стационарному состоянию, в котором вторые производные ковариаций равны нулю. Введены обобщенные кинетическая и потенциальная энергии, а также обобщенный гамильтониан и лагранжиан. Для обобщенного гамильтониана получен ряд законов сохранения. С использованием законов сохранения и уравнений динамики получена система уравнений, связывающая значения обобщенных энергий в стационарном состоянии с начальными условиями. Показано, что в стационарном состоянии обобщенные кинетическая и потенциальная энергии равны. При этом кинетическая энергия, вообще говоря, не равным образом распределена по степеням свободы элементарной ячейки. Получено общее решение системы уравнений, в результате чего значения обобщенных энергий выражены через начальное значение обобщенного лагранжиана.

Для демонстрации предложенного подхода рассмотрен ряд конкретных решеток: одномерная цепочка с чередующимися массами и жесткостями; квадратная решетка, совершающая поперечные колебания; решетка графена, совершающая поперечные колебания; двумерная квадратная решетка; двумерная треугольная решетка. Для перечисленных решеток решена задача о колебаниях кинетической энергии в случае, когда частицы имеют случайные начальные скорости и нулевые перемещения. Для решеток, элементарная ячейка которых имеет несколько степеней свободы, решена задача о перераспределении энергии по степеням свободы. Для проверки аналитических результатов проведено сравнение с результатами численного интегрирования уравнений динамики решетки.

Результаты, полученные в данной главе, опубликованы в работах [9, 109, 115, 116, 197, 245, 246].

### Глава 3

## Перенос энергии в упругих твердых телах с кристаллической структурой

# 3.1 Обзор литературы по переносу энергии в кристаллах

Задача термомеханики деформируемого твердого тела состоит в расчете полей деформаций, напряжений и температуры в материалах и конструкциях при механических и тепловых внешних воздействиях. На макроуровне для решения задачи термомеханики может эффективно использоваться, например, хорошо разработанный аппарат линейной термоупругости [255]. В частности, задача об определении поля температуры, вызывающего термоупругие напряжения, на макроуровне в большинстве случаев успешно решается с использованием закона теплопроводности Фурье. Закон утверждает, что тепловой поток пропорционален градиенту температуры с коэффициентом пропорциональности, называемым коэффициентом теплопроводности. Недавние эксперименты показали, что в материалах, содержащих малое число дефектов, на микрои наноуровне тепловая энергия переносится волновым образом (баллистически) [19, 26, 78, 171]. В частности, показано, что во многих материалах, включая нанопроволоки [4, 78], нанотрубки [25], графен [7, 160, 212], силиконовые мембраны [87] и другие, коэффициент теплопроводности существенно зависит от длины образца, на котором проводились измерения. В таком случае коэффициент теплопроводности перестает быть характеристикой материала и закон Фурье может нарушаться. Поэтому необходима разработка теоретических моделей, описывающих баллистический перенос тепловой энергии в деформируемых твердых телах.

В литературе представлено несколько подходов к описанию баллистического переноса тепловой энергии. В континуальных теориях определяющие уравнения обычно вводятся в рамках феноменологического подхода. В частности, одно из феноменологических уравнений, описывающих волновые свойства распространения тепла, это уравнение Максвелла-Каттанео-Венотта [27, 202]. Данное уравнение, в отличие от уравнения теплопроводности Фурье, дает конечную скорость распространения тепла. Однако данное уравнение, как и закон Фурье, опирается на понятие коэффициента теплопроводности, который, как уже было сказано, на микроуровне не является характеристикой материала. Кроме того, уравнение Максвелла-Каттанео-Венотта предсказывает экспоненциальное затухание тепловых возмущений, в то время как в баллистическом режиме возмущения затухают по степенному закону [244, 117, 223]. Развитие феноменологических моделей баллистического распространения тепла усложняется отсутствием достаточного количества экспериментальных данных.

Другой подход к описанию распространения тепла на наноуровне состоит в использовании кинетического уравнения Больцмана [124, 165]. Уравнение Больцмана обычно упрощается с использованием ряда аппроксимаций для столкновительного члена, в частности, путем введения времени релаксации [15, 91, 124]. Это позволяет решать уравнение Больцмана численно [79, 154, 175], а также получать уравнения распространения тепла [24, 121, 146, 211]. В обоих случаях часто вводятся дополнительные предположения [186]. В частности, вкладом оптических колебаний в перенос тепла часто пренебрегают. Достаточно полные обзоры литературы по использованию уравнения Больцмана для описания распространения тепла можно найти, например, в работах [19, 135, 186]. В настоящей главе развивается другой подход к описанию баллистического переноса тепловой энергии. Формулы, описывающие перенос энергии, выводятся либо из уравнений динамики ковариаций, либо из точного решения уравнений динамики. Такой подход позволяет учесть все важные особенности дискретной системы, влияющие на распространение тепла. В частности, оценить вклад различных ветвей дисперсионного соотношения.

Анализ переноса тепловой энергии в дискретных системах обычно проводится в так называемом стационарном неравновесном состоянии [173, 135]. При этом дискретная система помещается между двумя термостатами с различными температурами. Эффективный коэффициент теплопроводности системы вычисляется по известной разности температур, расстоянию между термостатами и вычисленному тепловому потоку. Такая постановка задачи широко используется как в аналитических исследованиях [10, 173, 136], так и в компьютерном моделировании [31, 89, 135, 210] распространения тепла. Подробный обзор результатов, полученных в стационарной постановке, приведен в работах [16, 30, 135]. Вычисление эффективного коэффициента теплопроводности в зависимости от длины образца позволяет определить условия, при которых реализуется баллистический, аномальный или диффузионный режим распространения тепла. В первом случае коэффициент теплопроводности линейно растет с длиной, во втором — нелинейно растет, а в третьем — не зависит от длины. Однако стационарная постановка не позволяет определить закон распространения тепла. Кроме того, результаты, получаемые в стационарной постановке, могут существенно зависеть от выбора термостата [75, 89]. Поэтому в настоящем параграфе рассматривается нестационарная постановка задачи о переносе энергии.

Одной из задач исследования нестационарного переноса тепловой энергии является определение закона изменения начального поля кинетической энергии во времени и пространстве. Начальное поле может быть задано, например, путем задания частицам случайных начальных скоростей. В таком случае использование термостата не требуется. В литературе подобные задачи обычно решаются численно с использованием, например, метода молекулярной динамики [61, 62, 248, 123, 166, 200]. Данный метод позволяет использовать реалистичные потенциалы взаимодействия и учитывать влияние нелинейности, дефектов, границ раздела и других особенностей реальной системы, которые сложно учесть аналитически. Однако несмотря на огромные возможности численных методов, на некоторые вопросы все же проще ответить аналитически. В частности, для кристаллов с несколькими ветвями дисперсионного соотношения в численном моделировании сложно разделить вклад различных ветвей в перенос тепловой энергии.

Одной из удобных моделей для исследования баллистического переноса энергии является линейный (гармонический) кристалл — совокупность частиц, образующих кристаллическую решетку и взаимодействующих посредством сил, линейно зависящих от перемещений. В рамках данной модели гармонические волны не взаимодействуют друг с другом, поэтому перенос энергии имеет чисто баллистический характер. Нестационарный перенос тепловой энергии в гармонических кристаллах исследуется, например, в работах [241, 57, 230, 67, 244, 109, 150, 184]. В работе [244] получено уравнение, называемое баллистическим уравнением теплопроводности, описывающее изменение поля температуры в одномерной одноатомной цепочке с взаимодействиями ближайших соседей. Данное уравнение выполняется также для цепочки на линейном упругом основании [241]. В настоящей главе предлагаются подходы, позволяющие описывать баллистический перенос энергии в скалярных решетках и решетках, элементарная ячейка которых содержит несколько частиц.

Глава состоит из трех параграфов. В параграфе 3.2 рассматривается пере-

нос энергии в линейных скалярных решетках простой структуры, в которых каждая частица имеет одну степень свободы. Перенос энергии описывается с использованием ковариационного подхода. Выводится система уравнений, описывающих динамику ковариаций перемещений и скоростей частиц. В данной системе проводится разделение движений на быстрые и медленные. Для медленных дополнительно проводится континуализация по пространственной переменной. Решение получающегося в результате дифференциально-разностного уравнения дает выражение, описывающее изменение поля кинетической энергии в решетке. В качестве примера решается ряд задач о переносе энергии в квадратной решетке, совершающей поперечные колебания.

В параграфе 3.3 рассматривается перенос энергии в кристаллах со сложной структурой, элементарная ячейка которых содержит произвольное число частиц с произвольным числом степеней свободы. Уравнения движения элементарной решетки записываются в матричной форме, использованной в главе 2. Данная форма позволяет в едином виде записать уравнения для широкого класса решеток с взаимодействием произвольного числа соседей. Уравнения динамики решетки решаются точно с использованием дискретного преобразования Фурье. На основе полученного решения строится точное выражение для поля кинетической энергии. Выводится приближенное выражение для энергии, позволяющее существенно упростить аналитические выкладки. В качестве примера получается решение ряда задач с различными начальными профилями энергии. В частности, получается решение задачи о затухании начального синусоидального распределения энергии. Данная задача имеет важное значение, т.к. оно напрямую связано с экспериментальной процедурой, называемой transient thermal grating (TTG) [80, 87, 174]. В рамках TTG синусоидальное поле начальной кинетической энергии (температуры) генерируется за счет интерференции двух лазерных лучей. Выравнивание поля температуры за счет теплопроводности позволяет получать информацию о тепловых свойствах материала. Изложенная теория применяется для описания распространения тепла в двухатомной одномерной цепочке и решетке графена, совершающей поперечные колебания.

В параграфе 3.4 решаются задачи о подводе энергии в одномерный кристалл, который моделируется линейной цепочкой на упругом основании. Подвод энергии осуществляется за счет гармонического по времени кинематического или силового воздействия на одну из частиц. Решаются уравнения динамики цепочки при периодических граничных условиях. В случае кинематического воздействия для этого используется разложение по собственным формам, а при силовом — дискретное преобразование Фурье. Получающиеся в результате решения перемещения частиц используются для вычисления полной энергии системы. Точные выражения для энергии имеют громоздкий вид и неудобны для анализа. Поэтому выводятся простые формулы, описывающие асимптотическое поведение энергии на больших временах. Определяется зависимость скорости роста энергии от частоты внешнего воздействия. Проводится сравнение получающихся дискретных решений с результатами решения аналогичных задач для континуальных стержней. Обсуждаются сходства и различия дискретных и континуальных решений.

Основные результаты, полученные в главе, опубликованы в работах [109, 110, 117, 113].

### 3.2 Перенос энергии в упругих телах со скалярной кристаллической решеткой

#### 3.2.1 Уравнения движения и начальные условия

Рассмотрим гармоническую решетку простой структуры в пространстве размерности d = 1, 2. Каждая частица решетки имеет одну степень свободы. В таком случае перемещение частицы задается скалярной функцией  $u(\mathbf{x})$ , где  $\mathbf{x}$ — радиус-вектор частицы в недеформированном состоянии. Каждая частица взаимодействует с соседями, нумеруемыми индексом *α*. Векторы **a**<sub>*α*</sub>, соединяющие частицу с ее соседями, удовлетворяют соотношению:

$$\mathbf{a}_{\alpha} = -\mathbf{a}_{-\alpha}.\tag{3.1}$$

При этом автоматически выполняется  $\mathbf{a}_0 = 0$ .

Рассматриваются только линейные (гармонические) решетки, в которых сила, действующая на каждую частицу, представима в виде линейной комбинации перемещений всех частиц. Поэтому уравнение движения может быть записано в виде

$$\ddot{u}(\mathbf{x}) = Du(\mathbf{x}), \qquad Du(\mathbf{x}) = \omega_*^2 \sum_{\alpha} b_{\alpha} u(\mathbf{x} + \mathbf{a}_{\alpha}), \quad b_{\alpha} = b_{-\alpha}, \quad (3.2)$$

где  $\omega_*$  — характерная частота (см. например формулы (2.3), (2.5)); D — линейный разностный оператор.

Дисперсионное соотношение для скалярных решеток, описываемых уравнениями (3.2), было получено ранее во второй главе:

$$\omega^{2}(\mathbf{k}) = -\omega_{*}^{2} \left( b_{0} + 2\sum_{\alpha>0} b_{\alpha} \cos\left(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_{\alpha}\right) \right), \qquad \mathbf{k} = \frac{1}{a} \sum_{j=1}^{d} p_{j} \tilde{\mathbf{e}}_{j}. \tag{3.3}$$

Важно также помнить, что дисперсионное соотношение четно относительно знака волнового вектора  $\omega(\mathbf{k}) = \omega(-\mathbf{k}).$ 

Рассматриваются следующие стохастические начальные условия, типичные для молекулярно-динамического моделирования:

$$u(\mathbf{x}) = 0, \qquad v(\mathbf{x}) = v_0(\mathbf{x}), \qquad (3.4)$$

где  $v = \dot{u}$ ; начальные скорости  $v_0(\mathbf{x})$  — некореллированные случайные величины с нулевым математическим ожиданием. Начальные условия (3.4) соответствуют некоторому начальному распределению кинетической энергии в решетке. Далее рассматриваются изменения данного начального поля во времени, связанные с переносом энергии.

#### 3.2.2 Уравнение динамики ковариации скоростей

В настоящем параграфе производится переход от стохастической начальной задачи для перемещений частиц к детерминированной начальной задаче для ковариаций скоростей.

Как и ранее ковариация скоростей частиц с радиус-векторами **x** и **y** определяется формулой

$$\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \left\langle v(\mathbf{x})v(\mathbf{y}) \right\rangle. \tag{3.5}$$

Здесь и далее угловыми скобками  $\langle ... \rangle$  обозначается математическое ожидание. В расчетах математическое ожидание заменяется на среднее по реализациям с различными начальными условиями.

Основной исследуемой величиной является математическое ожидание кинетической энергии частицы T (далее для краткости будем называть ее просто кинетической энергией). Кинетическая энергия связана с ковариацией скоростей следующим соотношением:

$$T(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}M\left\langle v(\mathbf{x})^2 \right\rangle = \frac{1}{2}M\kappa|_{\mathbf{x}=\mathbf{y}}.$$
(3.6)

В параграфе 2.2 показано, что ковариации скоростей удовлетворяют уравнениям:

$$\ddot{\kappa} - 2\left(D_x + D_y\right)\ddot{\kappa} + \left(D_x - D_y\right)^2\kappa = 0, \qquad (3.7)$$

$$D_x \kappa = \omega_*^2 \sum_{\alpha} b_{\alpha} \kappa(\mathbf{x} + \mathbf{a}_{\alpha}, \mathbf{y}), \quad D_y \kappa = \omega_*^2 \sum_{\alpha} b_{\alpha} \kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y} + \mathbf{a}_{\alpha}).$$
 (3.8)

Уравнение (3.7) *в точности* описывает поведение поля кинетической энергии в любой линейной скалярной решетке. Начальные условия к уравнению (3.7), соответствующие начальным условиям для частиц (3.4), имеют вид:

$$\kappa = \frac{2}{M} T_0(\mathbf{x}) \delta_D(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad \dot{\kappa} = 0, \quad \ddot{\kappa} = \frac{2}{M} \left( D_x + D_y \right) \left( T_0(\mathbf{x}) \delta_D(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \right), \quad \ddot{\kappa} = 0,$$
  
$$2T_0(\mathbf{x}) = M \left\langle v_0(\mathbf{x})^2 \right\rangle,$$
  
(3.9)

где  $T_0(\mathbf{x})$  — начальное пространственное распределение кинетической энергии; функция  $\delta_D(\mathbf{x} - \mathbf{y})$  равна единице при  $\mathbf{x} = \mathbf{y}$  и нулю при  $\mathbf{x} \neq \mathbf{y}$ .

Таким образом, изменение во времени ковариаций скоростей и, в частности, распределение кинетической энергии описывается детерминированной начальной задачей (3.7), (3.9).

#### 3.2.3 Точное решение уравнения динамики ковариаций

В настоящем параграфе строится точное решение начальной задачи (3.7), (3.9).

Применяя в уравнении (3.7) дискретное преобразование Фурье по переменным **x** и **y**, получим

$$\hat{\kappa} - 2\left(\hat{D}_x + \hat{D}_y\right)\ddot{\kappa} + \left(\hat{D}_x - \hat{D}_y\right)^2\dot{\kappa} = 0,$$

$$\hat{\kappa}\left(\mathbf{k}_x, \mathbf{k}_y\right) = \Phi\left(\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y})\right), \qquad \Phi\left(D_x\kappa\right) = \hat{D}_x\left(\mathbf{k}_x\right)\dot{\kappa}, \qquad \Phi\left(D_y\kappa\right) = \hat{D}_y\left(\mathbf{k}_y\right)\dot{\kappa}.$$

$$(3.10)$$

Начальные условия к уравнению (3.10) следуют из (3.9):

$$\hat{\kappa} = \frac{2}{M} \sum_{\mathbf{z}} T_0(\mathbf{z}) e^{-\mathrm{i}(\mathbf{k}_x + \mathbf{k}_y) \cdot \mathbf{z}}, \quad \dot{\hat{\kappa}} = 0, \quad \ddot{\kappa} = \left(\hat{D}_x + \hat{D}_y\right) \hat{\kappa}, \quad \ddot{\hat{\kappa}} = 0.$$
(3.11)

Корни характеристического уравнения для (3.10) имеют вид:

$$\omega_{1,2}^2 = -\hat{D}_x - \hat{D}_y \pm \sqrt{\left(\hat{D}_x + \hat{D}_y\right)^2 - \left(\hat{D}_x - \hat{D}_y\right)^2}.$$
 (3.12)

Тогда решение уравнения (3.10) с начальными условиями (3.11) имеет вид:

$$\hat{\kappa} = \frac{1}{M} \sum_{\mathbf{z}} T_0(\mathbf{z}) e^{-\mathrm{i}(\mathbf{k}_x + \mathbf{k}_y) \cdot \mathbf{z}} \Big( \cos\left(\omega_1 t\right) + \cos\left(\omega_2 t\right) \Big).$$
(3.13)

Применяя обратное преобразование Фурье, получим, в частности, следующее выражение для кинетической энергии:

$$T(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \int_{\mathbf{k}_x} \int_{\mathbf{k}_y} \sum_{\mathbf{z}} T_0(\mathbf{z}) e^{i(\mathbf{k}_x + \mathbf{k}_y) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{z})} (\cos(\omega_1 t) + \cos(\omega_2 t)) d\mathbf{k}_x d\mathbf{k}_y.$$
(3.14)

Кратность данного интеграла равна удвоенной размерности пространства. Видно, что использование точного решения уравнения динамики ковариаций для описания эволюции поля кинетической энергии сопряжено с большим объемом вычислений (двойной интеграл и суммирование по всем частицам). Поэтому далее рассматривается динамика ковариаций в континуальном приближении.

#### 3.2.4 Континуализация уравнения динамики ковариаций

В настоящем параграфе выводится приближенное выражение для поля кинетической энергии, справедливое в континуальном пределе. Данное выражение требует меньшего объема вычислений, чем точное решение (3.14).

Как было показано выше, ковариации скоростей удовлетворяют уравнению:

$$\ddot{\kappa} - 2(D_x + D_y)\ddot{\kappa} + (D_x - D_y)^2\kappa = 0.$$
 (3.15)

Проведем в данном уравнении континуализацию. Для этого введем переменные

$$(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \to (\mathbf{r}, \, \mathbf{x} - \mathbf{y}), \qquad \mathbf{r} = \frac{\mathbf{x} + \mathbf{y}}{2}.$$
 (3.16)

Тогда ковариация скоростей представляется в виде  $\kappa(\mathbf{r}, \mathbf{x} - \mathbf{y})$ . Проведем кон-

тинуализацию операторов  $D_x$ ,  $D_y$ . Рассмотрим выражение

$$D_x \kappa \left( \mathbf{r}, \mathbf{x} - \mathbf{y} \right) = \omega_*^2 \sum_{\alpha} b_{\alpha} \kappa \left( \mathbf{r} + \frac{1}{2} \mathbf{a}_{\alpha}, \mathbf{x} - \mathbf{y} + \mathbf{a}_{\alpha} \right).$$
(3.17)

Предположим, что функция  $\kappa$  медленно меняется с изменением первого аргумента на расстояниях порядка  $|\mathbf{a}_{\alpha}|$ . Тогда разложение правой части (3.17) в ряд по  $\mathbf{a}_{\alpha}$  дает

$$D_{x}\kappa \approx \omega_{*}^{2} \sum_{\alpha} b_{\alpha} S_{\alpha}\kappa + \frac{\omega_{*}^{2}}{2} \sum_{\alpha} b_{\alpha} S_{\alpha} \mathbf{a}_{\alpha} \cdot \nabla \kappa = (D + \mathcal{R} \cdot \nabla) \kappa,$$
  
$$\mathcal{R} = \frac{\omega_{*}^{2}}{2} \sum_{\alpha} b_{\alpha} S_{\alpha} \mathbf{a}_{\alpha}, \qquad D = \omega_{*}^{2} \sum_{\alpha} b_{\alpha} S_{\alpha}, \qquad S_{\alpha}\kappa = \kappa \left(\mathbf{r}, \mathbf{x} - \mathbf{y} + \mathbf{a}_{\alpha}\right),$$
(3.18)

где  $\nabla = \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}$  — набла-оператор. Формулы (3.18) дают  $D_x \approx D + \mathcal{R} \cdot \nabla$ . Аналогично можно показать, что

$$D_y \approx D - \mathcal{R} \cdot \nabla.$$
 (3.19)

Тогда для суммы и разности операторов имеем:

$$D_x - D_y \approx 2\mathcal{R} \cdot \nabla, \qquad D_x + D_y \approx 2D.$$
 (3.20)

Подстановка выражений (3.20) в уравнение динамики ковариций (3.7) и начальные условия (3.9) дает уравнение

$$\ddot{\kappa} - 4D\ddot{\kappa} + 4\left(\boldsymbol{\mathcal{R}}\cdot\boldsymbol{\nabla}\right)^2\kappa = 0 \tag{3.21}$$

с начальными условиями

$$\kappa = \frac{2}{M} T_0(\mathbf{r}) \delta_D(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad \dot{\kappa} = 0, \quad \ddot{\kappa} = \frac{4}{M} T_0(\mathbf{r}) D \delta_D(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad \dddot{\kappa} = 0.$$
(3.22)

Рассмотрим дискретное преобразование Фурье уравнения (3.21) по перемен-

ной  $\mathbf{x} - \mathbf{y}$ . Воспользуемся тождеством:

$$\Phi\left(\kappa(\mathbf{z} + \mathbf{a}_{\alpha})\right) = \Phi\left(\kappa(\mathbf{z})\right) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_{\alpha}}.$$
(3.23)

С использованием данного тождества можно показать, что

$$\Phi(D\kappa) = \hat{D}\hat{\kappa}, \quad \hat{D} = \omega_*^2 \sum_{\alpha} b_{\alpha} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_{\alpha}}, \quad \Phi(\mathcal{R}\kappa) = \hat{\mathcal{R}}\hat{\kappa}, \quad \hat{\mathcal{R}} = \frac{\omega_*^2}{2} \sum_{\alpha} b_{\alpha}\mathbf{a}_{\alpha} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_{\alpha}}.$$
(3.24)

Вычисляя преобразование Фурье от уравнения (3.21) с использованием тождеств (3.24), получим

$$\hat{\kappa} - 4\hat{D}\hat{\kappa} + 4\left(\hat{\boldsymbol{\mathcal{R}}}\cdot\nabla\right)^{2}\hat{\kappa} = 0.$$
(3.25)

Введем вектор с:

$$\mathbf{c} = \frac{\mathrm{Im}\hat{\mathcal{R}}}{\sqrt{-\hat{D}}}.$$
(3.26)

Дифференцируя выражение (3.24) для  $\hat{D}$  по **k** можно показать, что  $\hat{D}$  и  $\hat{\mathcal{R}}$  связаны соотношением:

$$\hat{\mathcal{R}} = -\frac{\mathrm{i}}{2} \frac{\mathrm{d}\hat{D}}{\mathrm{d}\mathbf{k}}.$$
(3.27)

Подстановка (3.27) в формулу (3.26) дает

$$\mathbf{c} = \frac{\mathrm{d}\sqrt{-\hat{D}}}{\mathrm{d}\mathbf{k}}.$$
(3.28)

Покажем, что введенная таким образом величина **с** совпадает с вектором групповой скорости. Рассмотрим дисперсионное соотношение для рассматриваемой решетки (см. параграф 2.2):

$$\omega^2 = -\omega_*^2 \sum_{\alpha} b_{\alpha} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_{\alpha}} = -\hat{D}.$$
(3.29)

Комбинируя дисперсионное соотношение (3.29) с формулами (3.24), (3.28), по-

лучим

$$\mathbf{c} = \mathbf{v}_g = \frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}\mathbf{k}} = \sum_{i=1}^d \frac{\partial\omega}{\partial p_i} a_i \mathbf{e}_i, \qquad \mathbf{k} = \sum_{j=1}^d \frac{p_j}{a_j} \tilde{\mathbf{e}}_j.$$
(3.30)

Видно, что  $\mathbf{c}$  совпадает с вектором групповой скорости  $\mathbf{v}_q$ .

Перепишем уравнение (3.25) с использованием вектора групповой скорости и дисперсионного соотношения:

$$\hat{\kappa} + 4\omega^2 \hat{\kappa} - 4\omega^2 \left(\mathbf{v}_g \cdot \nabla\right)^2 \hat{\kappa} = 0.$$
(3.31)

При этом начальные условия для уравнения (3.31) имеют вид:

$$\hat{\kappa} = \frac{2}{M} T_0(\mathbf{r}), \quad \dot{\hat{\kappa}} = 0, \quad \ddot{\hat{\kappa}} = -\frac{4}{M} T_0(\mathbf{r}) \omega^2, \quad \ddot{\hat{\kappa}} = 0.$$
(3.32)

Для решения данного уравнения можно применить два подхода.

При первом подходе говорится, что на малых временах основную роль в уравнении (3.31) играют два первых слагаемых, а на больших — последние два слагаемых. В результате, отбрасывая первое или последнее слагаемое, получаем уравнения быстрых и медленных движений:

$$\ddot{\kappa} + 4\omega^2 \ddot{\kappa} = 0, \qquad \ddot{\kappa} - (\mathbf{v}_g \cdot \nabla)^2 \hat{\kappa} = 0.$$
 (3.33)

При решении первого уравнения необходимо удовлетворить начальным условиям (3.32). При этом, вообще говоря, не ясно, с какими начальными условиями нужно решать уравнение для медленных движений. Численное моделирование показывает, что в качестве начальных условий для медленных движений можно использовать:

$$\hat{\kappa} = \frac{1}{M} T_0(\mathbf{r}), \quad \dot{\hat{\kappa}} = 0.$$
(3.34)

Здесь множитель 1/2 возникает из-за того, что в результате быстрого процесса кинетическая стремится к константе, равной  $T_0/2$ , а ее производная — к нулю (см. главу 2).

Второй подход состоит в изменении уравнения (3.31). Добавим в него "малое" слагаемое  $(\mathbf{v}_g \cdot \nabla)^2 \ddot{\hat{\kappa}}$ , тогда уравнение примет вид:

$$\ddot{\kappa} + 4\omega^2 \ddot{\kappa} - (\mathbf{v}_g \cdot \nabla)^2 \ddot{\kappa} + 4\omega^2 (\mathbf{v}_g \cdot \nabla)^2 \dot{\kappa} = 0.$$
(3.35)

Получившееся уравнение (2.56) факторизуется:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} + 4\omega^2\right) \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \left(\mathbf{v}_g \cdot \nabla\right)^2\right) \hat{\kappa} = 0.$$
(3.36)

Решение уравнения (3.36) равно сумме решений уравнений для быстрых и медленных движений

$$\ddot{\hat{\kappa}} + 4\omega^2 \hat{\kappa} = 0, \qquad (3.37)$$

$$\ddot{\hat{\kappa}} - \left(\mathbf{v}_g \cdot \nabla\right)^2 \hat{\kappa} = 0. \tag{3.38}$$

Видно, что получаются уравнения, аналогичные (3.33). Отличие заключается в том, что начальным условиям (3.32) должна удовлетворять сумма решений данных уравнений. Отметим, что для медленных движений получается фактически одномерное волновое уравнение (волна распространяется в направлении вектора групповой скорости  $\mathbf{v}_g$ ). Общие решения уравнений (3.37) и (3.38) имеют вид:

$$\hat{\kappa}_F = A(\mathbf{r})\cos(2\omega t) + B(\mathbf{r})\sin(2\omega t), \qquad \hat{\kappa}_S = C(\mathbf{r} + \mathbf{v}_g t) + D(\mathbf{r} - \mathbf{v}_g t). \quad (3.39)$$

Вторая из формул представляет собой решение типа Даламбера (две волны, бегущие в разные стороны). Данное решение может быть получено, например, путем факторизации уравнения (3.38).

Начальные условия дают следующую систему уравнений для нахождения

функций A, B, C, D:

$$A(\mathbf{r}) + B(\mathbf{r}) + C(\mathbf{r}) + D(\mathbf{r}) = \frac{1}{M}T_0(\mathbf{r}),$$
  

$$2\omega(B(\mathbf{r}) - A(\mathbf{r})) + \mathbf{v}_g \cdot \nabla (C(\mathbf{r}) - D(\mathbf{r})) = 0,$$
  

$$-4\omega^2(A(\mathbf{r}) + B(\mathbf{r})) + (\mathbf{v}_g \cdot \nabla)^2 (C(\mathbf{r}) + D(\mathbf{r})) = -2\frac{1}{M}T_0(\mathbf{r})\omega^2,$$
  

$$8\omega^3(B(\mathbf{r}) - A(\mathbf{r})) + (\mathbf{v}_g \cdot \nabla)^3 (C(\mathbf{r}) - D(\mathbf{r})) = 0.$$
  
(3.40)

Точно решить данную систему дифференциальных уравнений в частных производных довольно сложно, поэтому ограничимся следующим "приближенным решением":

$$A = 2C = 2D = \frac{T_0(\mathbf{r})}{M}, \qquad B = 0.$$
 (3.41)

Данное решение опирается на то, что на малых временах  $\ddot{\hat{\kappa}}_F \gg \ddot{\hat{\kappa}}_S$ , поэтому в третьем уравнении можно пренебречь  $(\mathbf{v}_g \cdot \nabla)^2 (C(\mathbf{r}) + D(\mathbf{r}))$  по сравнению с остальными слагаемыми. Тогда

$$\hat{\kappa} = \hat{\kappa}_F + \hat{\kappa}_S = \frac{T_0(\mathbf{r})}{M} \cos(2\omega t) + \frac{1}{2M} \left( T_0(\mathbf{r} + \mathbf{v}_g t) + T_0(\mathbf{r} - \mathbf{v}_g t) \right).$$
(3.42)

Формула (3.42) является решением уравнения (3.36), но при этом, в общем случае, не удовлетворяет начальному условию для второй производной:  $\ddot{\kappa}|_{t=0} = -\frac{4}{M}T_0(\mathbf{r})\omega^2$ . Применяя к формуле (3.42) дискретное преобразование Фурье, получим:

$$T = T_F + T_S, (3.43)$$

$$T_F = \frac{T_0(\mathbf{r})}{2} \Phi^{-1} \left( \cos(2\omega(\mathbf{k})t) \right), \qquad T_S = \frac{1}{4} \Phi^{-1} \left( T_0(\mathbf{r} + \mathbf{v}_g(\mathbf{k})t) + T_0(\mathbf{r} - \mathbf{v}_g(\mathbf{k})t) \right).$$
(3.44)

Формула (3.43) получена для конечного или бесконечного кристалла при периодических граничных условиях. В случае бесконечного кристалла она принимает вид:

$$T_F = \frac{T_0(\mathbf{r})}{2(2\pi)^d} \int_{-\pi}^{\pi} \cos(2\omega t) dp_1 ... dp_d, \qquad (3.45)$$

$$T_{S} = \frac{1}{4(2\pi)^{d}} \int_{-\pi}^{\pi} \left( T_{0}(\mathbf{r} + \mathbf{v}_{g}t) + T_{0}(\mathbf{r} - \mathbf{v}_{g}t) \right) \mathrm{d}p_{1}...\mathrm{d}p_{d}.$$
(3.46)

Формулы (3.43), (3.45), (3.46) описывают поведение кинетической энергии. Видно, что она представлена в виде суммы двух слагаемых. Первое слагаемое,  $T_F$ , описывает поведение кинетической энергии на малых временах, а второе слагаемое,  $T_S$ , — поведение на больших временах.

Отметим, что формулы (3.43), (3.45), (3.46) являются приближенными. Для их получения необходимо пользоваться одним из двух подходов, приведенных выше: либо откидывать слагаемые в уравнении либо наоборот — добавлять слагаемые. Оба подхода приводят в конечном итоге к одному и тому же результату. Справедливость предположений, использованных при получении приближенного решения, подтверждается тем, что во-первых, в следующем параграфе аналогичные выражения получаются другим способом, а во-вторых — хорошим согласием с результатами численного решения уравнений движения.

#### 3.2.4.1 Фундаментальное решение для одномерных цепочек

В данном параграфе выводится фундаментальное решение задачи о распространении энергии в одномерных цепочках, описываемых уравнением (3.2). Рассматривается только слагаемое  $T_S$ , связанное с переносом.

Рассматривается следующее начальное распределение кинетической энергии

$$T_0(x) = A\delta(x), \tag{3.47}$$

где  $\delta$  — дельта-функция Дирака; множитель A необходим для получения решения в единицах правильной размерности. В таком случае решение (3.46) принимает вид:

$$T_{S} = \frac{A}{4\pi} \int_{0}^{\pi} \left( \delta \left( x - ct \right) + \delta \left( x + ct \right) \right) \mathrm{d}p, \qquad c = \frac{\omega_{*}a \sum_{\alpha > 0} b_{\alpha} \alpha \sin \left( \alpha p \right)}{\sqrt{-b_{0} - 2 \sum_{\alpha > 0} b_{\alpha} \cos \left( \alpha p \right)}}.$$
(3.48)

Интеграл вычисляется с использованием тождества [224]:

$$\int \delta\Big(\phi(x)\Big)\psi(x)\mathrm{d}x = \sum_{j} \frac{\psi(x_j)}{|\phi'(x_j)|}, \qquad \phi(x_j) = 0.$$
(3.49)

Здесь суммирование проводится по вещественным корням,  $x_j$ , уравнения  $\phi(x) = 0$ . Вычисление интеграла (3.48) с использованием тождества (3.49) дает фундаментальное решение:

$$T_S = \frac{A}{4\pi t} \sum_j \frac{1}{|c'(p_j)|}, \qquad |c(p_j)| = \frac{|x|}{t}, \qquad c' = \frac{\mathrm{d}c}{\mathrm{d}p}.$$
 (3.50)

Здесь суммирование ведется по всем вещественным корням,  $p_j \in [-\pi; \pi]$ , второго уравнения. Функция *с* определена формулой (3.48). Формула (3.50) показывает, что температура стремится к бесконечности в экстремумах функции c(p).

Таким образом, формула (3.50) представляет собой фундаментальное решением задачи о распространении тепла в одномерных цепочках с взаимодействием произвольного числа соседей. С использованием фундаментального решения общее решение задачи при произвольном начальном распределении кинетической энергии  $T_0(x)$  имеет вид:

$$T_S = \frac{c_*}{4\pi} \sum_j \int_{-1}^1 \frac{T_0(x + zc_*t)}{|c'(p_j)|} dz, \qquad |c(p_j)| = c_*|z|.$$
(3.51)

Приведенные выше решения показывают, что энергия распространяется волновым способом. Определим скорость фронта энергии для одномерных це-

почек. Предположим, что функция c(p) ограничена. Тогда существует максимальное значение |x|, при котором второе из уравнений (3.50) имеет решение. Данное значение определяет положение фронта. Из формул (3.50) следует, что фронт фундаментального решения распространяется с конечной скоростью  $c_*$ , равной максимальной групповой скорости:

$$c_* = \max_p |c(p)|.$$
 (3.52)

Покажем, что при произвольном начальном распределении энергии  $T_0(x)$  скорость фронта будет такой же. Общее решение, соответствующее данному начальному распределению, задается формулой (3.51). Предположим, что  $T_0(x)$ не равно нулю в интервале  $[x_{min}; x_{max}]$ . Тогда из формулы (3.51) следует, что в момент времени t температура отлична от нуля для  $x \in [x_{min} - c_*t; x_{max} + c_*t]$ . Следовательно, фронт энергии в одномерных цепочках распространяется с постоянной скоростью, равной максимальной групповой скорости. Данный результат также был получен в работе [62] с использованием асимптотических методов.

#### 3.2.4.2 Фундаментальное решение для двумерных скалярных решеток

В данном параграфе в общем виде выводится фундаментальное решение задачи о переносе энергии для множества двумерных скалярных решеток, подчиняющихся уравнению движения (3.2). Рассматривается следующее распределение начальной кинетической энергии:

$$T_0 = A\delta(\mathbf{r}) = A\delta(x)\delta(y), \qquad (3.53)$$

где x, y — декартовы координаты. Подстановка начальных условий (3.53) в общее решение (3.46) дает

$$T_S = \frac{A}{16\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \left( \delta \left( \mathbf{r} + \mathbf{v}_g t \right) + \delta \left( \mathbf{r} - \mathbf{v}_g t \right) \right) \mathrm{d}p_1 \mathrm{d}p_2.$$
(3.54)

Радиус-вектор <br/>г и вектор групповой скорости $\mathbf{v}_g$  представляются в виде

$$\mathbf{r} = x\mathbf{i} + y\mathbf{j}, \qquad \mathbf{v}_g = c_x\mathbf{i} + c_y\mathbf{j}, \qquad (3.55)$$

где **i**, **j** — единичные векторы, соответствующие осям x и y. Сделаем замену переменных  $(p_1, p_2) \rightarrow (c_x, c_y)$  в формуле (3.54) и вычислим получившийся интеграл с использованием тождества (3.49). Тогда

$$T_{S} = \frac{A}{16\pi^{2}t^{2}} \sum_{j} \frac{1}{|G(p_{1}^{j}, p_{2}^{j})|}, \qquad G = \frac{\partial c_{x}}{\partial p_{1}} \frac{\partial c_{y}}{\partial p_{2}} - \frac{\partial c_{x}}{\partial p_{2}} \frac{\partial c_{y}}{\partial p_{1}},$$

$$\begin{bmatrix} c_{x} = \frac{x}{t}, & c_{y} = \frac{y}{t}, \\ c_{x} = -\frac{x}{t}, & c_{y} = -\frac{y}{t}, \end{bmatrix}$$
(3.56)

где *G* — якобиан преобразования; квадратные скобки обозначают логическое "или"; суммирование ведется по вещественным корням  $p_1^j, p_2^j \in [-\pi; \pi]$  системы уравнений (3.56).

На основе формулы (3.56) можно сделать два важных вывода. Во-первых, для решетки любой симметрии форма фронта фундаментального решения окружность. Иными словами, температура отлична от нуля в круге:

$$\left(\frac{x}{c_*t}\right)^2 + \left(\frac{y}{c_*t}\right)^2 \le 1, \qquad c_*^2 = \max_{p_1, p_2} \left(c_x^2 + c_y^2\right). \tag{3.57}$$

Во-вторых, температура в центральной точке x = 0, y = 0 затухает как  $1/t^2$ .

Таким образом, фундаментальное решение задачи о переносе энергии для множества двумерных скалярных решеток, описываемых уравнением движе-

ния (3.2), задается формулой (3.56). Решение имеет фронт в форме окружности, распространяющийся с постоянной скоростью, равной *c*<sub>\*</sub>. Пример построения фундаментального решения для растянутой квадратной решетки приведен в параграфе 3.2.5.2.

#### 3.2.4.3 Об отслеживании фронта в двумерных скалярных решетках (принцип Гюйгенса)

В предыдущем параграфе показано, что в фундаментальном решении фронт вне зависимости от симметрии решетки имеет форму окружности. При этом радиус окружности равен  $c_*t$ , где  $c_*$  — максимальная групповая скорость. В настоящем параграфе данный факт используется для определения положения фронта в случае произвольного начального распределения энергии.

Рассмотрим случай, когда начальная энергия отлична от нуля в некоторой односвязной области  $\Omega_0$ , ограниченной контуром  $\partial \Omega_0$  (см. рис. 3.1). Решение в



Рис. 3.1: Определение фронта при произвольном распределении начальной энергии.  $\partial \Omega_0$  — граница начального распределения энергии,  $\partial \Omega(t)$  — фронт в момент времени t.

момент времени t может быть получено из фундаментального с использованием принципа суперпозиции. Пользуясь данным принципом, нетрудно построить область  $\Omega(t)$ , в которой энергия будет отлична от нуля в момент времен t. Данная область получается в результате объединения области  $\Omega_0$  и всех кругов с центрами в  $\Omega_0$  и радиусами, равными  $c_*t$ . Граница получившейся области  $\partial\Omega(t)$ дает положение фронта в момент времени t. Данный метод позволяет быстро оценить форму и размеры области, в которой энергия отлична от нуля.

#### 3.2.4.4 О зависимости эффективного коэффициента теплопроводности от длины

В настоящем параграфе полученные выше формулы используются для описания переноса тепловой энергии. При этом считается, что введенная выше кинетическая энергия *T* пропорциональна кинетической температуре. Из формулы (3.46) следует, что теплопроводность в скалярных решетках имеет баллистический характер и не описывается законом Фурье. В таком случае коэффициент теплопроводности перестает быть константой материала и может быть определен по-разному в разных задачах. В работах [173, 159, 134, 50] показано, что в стационарном состоянии коэффициент теплопроводности в гармонических кристаллах пропорционален длине образца (расстоянию между тепловыми резервуарами). Основная задача данного параграфа состоит в том, чтобы показать, что аналогичная зависимость коэффициента теплопроводности от длины наблюдается в нестационарных задачах.

Рассматривается тепловой контакт двух полупространств, имеющих различные начальные температуры. Соответствующее начальное распределение температуры имеет вид

$$T_0(x) = T_1 + (T_2 - T_1)H(x), (3.58)$$

где H — функция Хевисяйда;  $T_1, T_2$  — начальные температуры полупространств x < 0 и x > 0 соответственно. Для коэффициента теплопроводности используется следующее определение

$$\lambda = -\frac{\int_{-L}^{L} h(x, t) dx}{T_S(L) - T_S(-L)},$$
(3.59)

где h — проекция вектора теплового потока на ось x. Выражение для теплового потока через силы межчастичного взаимодействия и скорости частиц в настоящем параграфе не используется; L — полудлина интервала осреднения. В случае выполнения закона Фурье уравнение (3.59) тождественно выполняется и коэффициент теплопроводности не зависит от длины L. Покажем, что для скалярных решеток это не так.

Вычислим тепловой поток *h* с использованием континуального уравнения баланса энергии. При отсутствии механического деформирования решетки и объемных источников тепла данное уравнение имеет вид:

$$\rho \dot{U} = -h', \qquad \rho = \frac{M}{V}, \qquad (3.60)$$

где V — объем, приходящийся на частицу, U — внутренняя энергия, приходящаяся на единицу массы. Из теоремы о вириале следует, что кинетическая и потенциальная энергии, приходящиеся на частицу равны  $k_BT/2$ . Тогда полная энергия, приходящаяся на частицу, равна  $k_BT$ , т.е.

$$U = \frac{k_B T_S}{M}.\tag{3.61}$$

Подстановка формулы (3.61) в уравнение баланса энергии (3.60) дает

$$\frac{k_B}{V}\dot{T}_S = -h'. \tag{3.62}$$

Формула (3.62) используется для вычисления теплового потока для заданного распределения температуры.

В случае одномерного распределения начальной температуры  $T_0(x)$  в d-

мерной решетке общее решение (3.46) принимает вид

$$T_{S} = \frac{1}{4(2\pi)^{d}} \int_{-\pi}^{\pi} \left( T_{0} \left( x + c_{x}t \right) + T_{0} \left( x - c_{x}t \right) \right) \mathrm{d}p_{1}...\mathrm{d}p_{d}, \qquad c_{x} = \mathbf{v}_{g} \cdot \mathbf{i}, \quad (3.63)$$

где  $\mathbf{i}$  — единичный вектор, направленный вдоль оси x. С использованием формулы (3.63) покажем, что решение задачи с начальным распределением температуры (3.58) является автомодельным:

$$T_{S} = \frac{T_{1}}{2} + \frac{T_{2} - T_{1}}{4(2\pi)^{d}} \int_{-\pi}^{\pi} \left[ H\left(\frac{x}{t} - c_{x}\right) + H\left(\frac{x}{t} + c_{x}\right) \right] dp_{1}...dp_{d} = T_{S}\left(\frac{x}{t}\right).$$
(3.64)

Интегрируя обе части формулы (3.60) от  $-\infty$  до x и предполагая, что  $h(-\infty) = 0$ , получим:

$$h = -\frac{k_B}{V} \int_{-\infty}^x \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} T_S\left(\frac{z}{t}\right) \mathrm{d}z = \frac{k_B}{V} \int_{-\infty}^{\frac{x}{t}} y T'_S(y) \,\mathrm{d}y \quad \Rightarrow \quad h = h\left(\frac{x}{t}\right). \tag{3.65}$$

Здесь штрихом обозначена производная по x/t. Формула (3.65) показывает, что выражение для теплового потока также является автомодельным.

Вычислим коэффициент теплопроводности по формуле (3.59). Выберем длину интервала осреднения L равной расстоянию, которое прошел тепловой фронт, т.е.  $L = c_* t$ , где  $c_* -$ максимальная групповая скорость. Тогда  $T_S(L) - T_S(-L) = \frac{1}{2} (T_2 - T_1)$ . Подставляя данное выражение в определение коэффициента теплопроводности (3.59) и используя формулу (3.65), получим:

$$\lambda = -\frac{2L}{T_2 - T_1} \int_{-1}^{1} h(z) \, \mathrm{d}z \quad \Rightarrow \quad \lambda \sim L.$$
(3.66)

Формула (3.66) показывает, что эффективный коэффициент теплопроводности линейно растет с длиной *L*. Отметим, что в ангармонических кристаллах данная зависимость может быть нелинейной (см. например, обзорную статью [135]).

Таким образом, показано, что в нестационарных задачах коэффициент теплопроводности ведет себя также, как и в стационарных задачах, рассмотренных, например, в работах [173, 159, 50]. Отметим, что формула (3.66) выведена для *любой* скалярной решетки, описываемой уравнениями движения (3.2).

#### 3.2.5 Примеры

## 3.2.5.1 Пример. Одномерная цепочка (взаимодействия ближайших соседей)

Рассмотрим одномерную цепочку с взаимодействием ближайших соседей. Уравнения движения цепочки имеют вид:

$$\ddot{u}(x) = \omega_*^2 \Big( u(x+a) - 2u(x) + u(x-a) \Big).$$
(3.67)

При этом *D* задается формулой (2.3). Перенос энергии описывается формулой (3.46). Подстановка дисперсионного соотношения (2.3) в выражение для групповой скорости (3.30) дает

$$c = \omega_* a \cos \frac{p}{2} \mathrm{sign} p. \tag{3.68}$$

Тогда общее решение имеет вид

$$T_S = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \left( T_0(x + c_* t \cos p) + T_0(x - c_* t \cos p) \right) dp, \qquad c_* = \omega_* a. \tag{3.69}$$

Соответствующее фундаментальное решение получается с использованием формулы (3.50):

$$T_S = \frac{A}{2\pi c_* t \sqrt{1 - \left(\frac{x}{c_* t}\right)^2}}.$$
(3.70)

Формулы (3.69), (3.70) в точности воспроизводят результаты, впервые полученные в работе [244].

Для того чтобы продемонстрировать различие временных масштабов быстрых и медленных процессов, рассмотрим начальные условия (3.9), соответствующие синусоидальному распределению температуры:

$$T_0(x) = B_0 \sin \frac{2\pi x}{L} + B_1, \qquad (3.71)$$

где *L* — длина волны начального распределения температуры; *B*<sub>1</sub> ≥ *B*<sub>0</sub>. Подстановка начальных условий (3.71) в формулы (3.45), (3.69) после алгебраических преобразований дает:

$$T = \frac{B_1}{2} \left( 1 + J_0(4\omega_* t) \right) + \frac{B_0}{2} \left( J_0(4\omega_* t) + J_0\left(\frac{2\pi c_* t}{L}\right) \right) \sin\frac{2\pi x}{L}.$$
 (3.72)

Формула (3.72) содержит два безразмерных времени (масштаба времени) —  $\omega_* t$ и  $c_* t/L$ . Первый временной масштаб определяется частотами колебаний отдельных атомов. Второй временной масштаб определяется временем, за которое волна, распространяющаяся с максимальной групповой скоростью, проходит расстояние L. Отношение данных временных масштабов, пропорциональное L/a, много больше единицы. Следовательно, быстрые и медленные процессы ( $T_F$  и  $T_S$ ) имеют существенно разные временные масштабы.

#### 3.2.5.2 Пример. Поперечные колебания квадратной решетки

#### Общие соотношения

Пусть ячейка периодичности решетки содержит  $N^2$  частиц, формирующих квадратную решетку. Радиус-векторы частиц в недеформированном состоянии задаются соотношениями:

$$\mathbf{x}_{n,m} = a \left( n \mathbf{i} + m \mathbf{j} \right), \qquad n, m = 0..N - 1, \tag{3.73}$$

где **i**, **j** — ортогональные единичные векторы; *a* — начальное расстояние между ближайшими соседями. Частицы соединены с соседями линейными пружинками. Равновесная длина пружинок меньше *a*, т.е. решетка растянута (в нерастянутой решетке поперечные колебания являются существенно нелинейными). Тогда линеаризованные уравнения поперечных колебаний имеют вид:

$$\ddot{u}_{n,m} = Du_{n,m}, \qquad Du_{n,m} = \omega_*^2 \left( u_{n+1,m} + u_{n,m+1} - 4u_{n,m} + u_{n-1,m} + u_{n,m-1} \right),$$
(3.74)

где  $u_{n,m} = u(\mathbf{x}_{n,m})$  — компонента вектора перемещения, соответствующая нормали к плоскости решетки. Видно, что уравнение (3.74) является частным случаем уравнения (3.2), где параметры  $\omega_*$ ,  $\mathbf{a}_{\alpha}$ ,  $b_{\alpha}$  определяются формулой (2.5). Периодические граничные условия для уравнений (3.74) имеют вид:

$$u_{n+C_1N,m+C_2N} = u_{n,m}, (3.75)$$

где  $C_1, C_2$  — целые числа.

В случае конечного *N* дисперсионное соотношение вычисляется по формулам (2.5), (2.7):

$$\omega(\mathbf{k}) = 2\omega_* \sqrt{\sin^2 \frac{\pi k_1}{N} + \sin^2 \frac{\pi k_2}{N}}, \quad \mathbf{k} = \frac{2\pi}{Na} \left( k_1 \mathbf{i} + k_2 \mathbf{j} \right), \quad k_1, k_2 = 0..N - 1.$$
(3.76)

Соответствующая групповая скорость определяется формулой (3.30):

$$\mathbf{v}_{g}(k_{1},k_{2}) = \frac{c_{*}\left(\sin\frac{2\pi k_{1}}{N}\mathbf{i} + \sin\frac{2\pi k_{1}}{N}\mathbf{j}\right)}{2\sqrt{\sin^{2}\frac{\pi k_{1}}{N} + \sin^{2}\frac{\pi k_{2}}{N}}}.$$
(3.77)

Формулы (3.76), (3.77) будут использоваться для вычисления поля кинетической энергии с использованием аналитического решения (3.46), которое в случае квадратной решетки принимает вид:

$$T_{S} = \frac{1}{4N^{2}} \sum_{k_{1},k_{2}=0}^{N-1} \Big( T_{0}(\mathbf{r} + \mathbf{v}_{g}(k_{1},k_{2})t) + T_{0}(\mathbf{r} - \mathbf{v}_{g}(k_{1},k_{2})t) \Big).$$
(3.78)

( - - · · · )
Для аналитических выкладок удобнее рассматривать предел  $N \to \infty$ . В таком случае величины  $p_i = 2\pi k_i/N$  равномерно заполняют весь интервал от 0 до  $2\pi$ , а дисперсионное соотношение и групповая скорость принимают вид:

$$\omega = 2\omega_* \sqrt{\sin^2 \frac{p_1}{2} + \sin^2 \frac{p_2}{2}}, \quad \mathbf{v}_g = \frac{c_* \left(\sin p_1 \mathbf{i} + \sin p_2 \mathbf{j}\right)}{2\sqrt{\sin^2 \frac{p_1}{2} + \sin^2 \frac{p_2}{2}}}, \quad \mathbf{k} = \frac{1}{a} \left(p_1 \mathbf{i} + p_2 \mathbf{j}\right),$$
(3.79)

где  $p_1, p_2 \in [0; 2\pi]$ . Формула для поля кинетической энергии принимает вид:

$$T_{S} = \frac{1}{8\pi^{2}} \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{2\pi} \left( T_{0}(\mathbf{r} + \mathbf{v}_{g}(p_{1}, p_{2})t) + T_{0}(\mathbf{r} - \mathbf{v}_{g}(p_{1}, p_{2})t) \right) dp_{1} dp_{2}.$$
(3.80)

Ранее отмечалось, что функция  $\omega(p_1, p_2) - 2\pi$ -периодическая по обеим переменным. Тогда групповая скорость, равная производной от  $\omega$ , также является  $2\pi$ -периодической. Следовательно, в формуле (3.80) можно перейти к интегрированию по симметричному интервалу  $[-\pi; \pi]$ , т.к. это интеграл от периодической функции по периоду:

$$T_{S} = \frac{1}{8\pi^{2}} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \left( T_{0}(\mathbf{r} + \mathbf{v}_{g}(p_{1}, p_{2})t) + T_{0}(\mathbf{r} - \mathbf{v}_{g}(p_{1}, p_{2})t) \right) dp_{1} dp_{2}.$$
(3.81)

Полученная формула будет использоваться далее для построения аналитических решений.

#### Фундаментальное решение плоской задачи

Решим задачу о переносе энергии с начальным условием:

$$T_0(x) = A\delta(x), \tag{3.82}$$

где ось x направлена вдоль базисного вектора  $\mathbf{a}_1 = a\mathbf{i}$ . Подстановка начального распределения (3.82) в (3.63) и использование формулы (3.79) дает:

$$T_{S} = \frac{A}{4\pi^{2}} \int_{0}^{\pi} \int_{0}^{\pi} \left( \delta \left( x - c_{x}t \right) + \delta \left( x + c_{x}t \right) \right) \mathrm{d}p_{1} \mathrm{d}p_{2}, \qquad c_{x} = \frac{c_{*} \sin p_{1}}{2\sqrt{\sin^{2} \frac{p_{1}}{2} + \sin^{2} \frac{p_{2}}{2}}}.$$
(3.83)

Сделаем подстановку  $\beta = \sin^2 \frac{p_1}{2}$ ,  $\gamma = \sin^2 \frac{p_2}{2}$  и рассмотрим случай t > 0, x > 0. Решение для x < 0 получается с использованием симметрии задачи. Тогда (3.83) принимает вид:

$$T_S = \frac{A}{4\pi^2} \int_0^1 \int_0^1 \frac{\delta\left(\tilde{x} - \sqrt{\frac{\beta(1-\beta)}{\beta+\gamma}}\right)}{\sqrt{\beta\gamma(1-\beta)(1-\gamma)}} \mathrm{d}\beta \mathrm{d}\gamma, \qquad \tilde{x} = \frac{x}{c_* t}.$$
 (3.84)

Один из интегралов вычисляется с использованием тождества (3.49). Аргумент дельта-функции в формуле (3.84) имеет корни, определяемые уравнением

$$\gamma = \frac{\beta}{\tilde{x}^2} \left( 1 - \tilde{x}^2 - \beta \right). \tag{3.85}$$

По определению 0 <br/>  $\leq \gamma \leq$  1. Тогда формулы (3.85) дают неравенства для<br/>  $\beta$ :

$$\beta \le 1 - \tilde{x}^2, \qquad \beta^2 - (1 - \tilde{x}^2)\beta + \tilde{x}^2 \ge 0.$$
 (3.86)

Решая неравенства (3.86) и используя тождество (3.49), получим:

$$T_{S} = \frac{A}{2\pi^{2}c_{*}t|\tilde{x}|} \begin{cases} f(0,1-\tilde{x}^{2}), \quad \sqrt{2}-1 \leq |\tilde{x}| \leq 1, \\ f(0,\beta_{1}) + f(\beta_{2},1-\tilde{x}^{2}), \quad |\tilde{x}| \leq \sqrt{2}-1, \\ \beta_{1,2} = \frac{1}{2} \left(1-\tilde{x}^{2} \mp \sqrt{(1-\tilde{x}^{2})^{2}-4\tilde{x}^{2}}\right), \\ f(\xi_{1},\xi_{2}) = \int_{\xi_{1}}^{\xi_{2}} \left(\frac{1-\beta}{(1-\tilde{x}^{2}-\beta)(\tilde{x}^{2}-\beta(1-\tilde{x}^{2}-\beta))}\right)^{\frac{1}{2}} d\beta, \end{cases}$$
(3.87)

Также  $T_S = 0$  для  $|\tilde{x}| \ge 1$ . Формула (3.87) показывает, что функция  $T_S c_* t / A$  зависит только от автомодельной переменной  $\tilde{x}$  (см. рис. 3.2). Из рисунка 3.2



Рис. 3.2: Решение задачи о переносе энергии в квадратной решетке с начальными условиями (3.82). Сплошная линия — формула (3.87); пунктирная линия — вертикальные асимптоты при  $|\tilde{x}| = \sqrt{2} - 1$ .

видно, что фронт распространяется с постоянной скоростью, равной  $c_*$ . Энергия имеет особенности в точках  $|\tilde{x}| = \sqrt{2} - 1$ . Отметим, что в одномерной цепочке энергия в аналогичной задаче имеет особенности на фронте, т.е. при  $|\tilde{x}| = 1$  (см. формулу (3.70)).

### Ступенчатое распределение начальной энергии

Рассмотрим контакт двух полуплоскостей с начальными энергиями  $T_1$  и  $T_2$  (см. формулу (3.58)). Отметим, что в случае, если кинетическая энергия движения частиц отождествляется с тепловой, данная задача тесно связана с классическим определением температуры [77]. Согласно данному определению, температуры двух тел в тепловом равновесии равны. Решение, получаемое ниже, показывает как происходит переход к тепловому равновесию. Начальное распределение кинетической энергии имеет вид:

$$T = T_1 + (T_2 - T_1)H(x), (3.88)$$

где  $H - функция Хевисайда, T_0 - разница энергий двух полуплоскостей. Под$ ставляя начальные условия (3.88) в решение (3.63) и используя свойства функ $ции Хевисайда и функции <math>c_x$ , получим:

$$T_{S} = \frac{1}{4} \left( T_{1} + T_{2} \right) + \frac{1}{2} \left( T_{2} - T_{1} \right) w \left( \frac{|x|}{t} \right) \operatorname{sign} \left( x \right),$$
  

$$w = \frac{1}{2\pi^{2}} \int_{0}^{\pi} \int_{0}^{\pi} H \left( |x| - c_{x}t \right) \mathrm{d}p_{1} \mathrm{d}p_{2}.$$
(3.89)

Сделаем подстановку  $\beta = \sin^2 \frac{p_1}{2}, \ \gamma = \sin^2 \frac{p_2}{2},$ тогда

$$w = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^1 \int_0^1 \frac{H\left(|\tilde{x}| - \sqrt{\frac{\beta(1-\beta)}{\beta+\gamma}}\right)}{\sqrt{\beta\gamma(1-\beta)(1-\gamma)}} d\beta d\gamma.$$
(3.90)

Интегранд в формуле (3.90) отличен от нуля при выполнении следующего неравенства:

$$\gamma \ge \frac{\beta}{\tilde{x}^2} \left( 1 - \tilde{x}^2 - \beta \right). \tag{3.91}$$

Неравенство (3.91) выполняется для  $\beta > 1 - \tilde{x}^2$ ;  $\beta$  также удовлетворяет второму из неравенств (3.86). Тогда интегрирование по  $\beta$  дает:

$$w = \frac{1}{4} + \frac{1}{2\pi} \arcsin |\tilde{x}| - \begin{cases} g(0, 1 - \tilde{x}^2), & \sqrt{2} - 1 \le |\tilde{x}| \le 1, \\ \frac{\arcsin \beta_2 - \arcsin \beta_1}{2\pi} + g(0, \beta_1) + g(\beta_2, 1 - \tilde{x}^2), & |\tilde{x}| \le \sqrt{2} - 1, \end{cases}$$
(3.92)  
$$g(z_1, z_2) = \frac{1}{2\pi^2} \int_{z_1}^{z_2} \frac{\arcsin \left(\frac{2\beta}{\tilde{x}^2} \left(1 - \tilde{x}^2 - \beta\right) - 1\right)}{\sqrt{\beta(1 - \beta)}} d\beta,$$

где  $\beta_1, \beta_2$  определены формулой (3.87);  $w = \frac{1}{2}$  для  $|\tilde{x}| \ge 1$ .

Таким образом, решение задачи задано формулами (3.89), (3.92). Видно, что решение (3.92) является автомодельным и зависит от  $\tilde{x} = x/(c_*t)$ .

Для проверки точности формул (3.89), (3.92) используется сравнение с численным решением уравнений динамики решетки (3.74). Без потери общности положим  $T_2 = 2T_1$ . В таком случае начальные условия для частиц имеют вид:

$$u_{n,m} = 0, \qquad v_{n,m} = \begin{cases} v_0, & n < 0, \\ \sqrt{2}v_0 & n \ge 0, \end{cases}$$
(3.93)

где  $v_0$  — случайная величина с дисперсией  $T_1 = M \left\langle v_0^2 \right\rangle$ . Используются периодические граничные условия. Ячейка периодичности содержит  $4\cdot 10^6$  частиц ( $4\cdot 10^2$ в направлении оси x и  $10^4$  в направлении оси y). В ходе моделирования энергия вычисляется по формуле (3.116), где математическое ожидание заменено на среднее по реализациям. В данной задаче осреднение проводится по 10<sup>3</sup> реализаций. Решение задачи является автомодельным, поэтому достаточно рассмотреть профиль температуры в один момент времени. В расчетах исследуется профиль энергии при  $t = 15\tau_*$ . К этому моменту времени колебаниями, связанными с перераспределением энергии между кинетической и потенциальной составляющими, можно пренебречь (см. параграф 2.2). Для повышения точности дополнительно проводится осреднение профиля по направлению у. Сравнение численных результатов с аналитическим решением (3.92) приведено на рис. 3.3. Небольшие различия между аналитическим и численным решениями наблюдаются в окрестности центральной точки x = 0. В данной точке кинетическая энергия имеет максимальный градиент (в начальный момент времени – бесконечный) и следовательно континуализация теряет точность. Вдали от центральной точки аналитическое решение (3.92) практически совпадает с численными результатами.



Рис. 3.3: Ступенчатое распределение начальной энергии в квадратной решетке. Линия — аналитическое решение (3.92), круги — численное решение уравнений динамики (3.74).

## Прямоугольное распределение начальной кинетической энергии. Волны энергии

В данном параграфе демонстрируется баллистический характер переноса энергии в рассматриваемой решетке. Рассматривается начальное распределение вида:

$$T_0(x) = 2T_1 \Big( H(x+L) - H(x-L) \Big), \tag{3.94}$$

где L — полудлина интервала с ненулевой начальной энергией. Решение задачи с начальными условиями (3.94) строится с использованием формулы (3.92) и принципа суперпозиции. Результирующее распределение кинетической энергии для нескольких моментов времени показано на рис. 3.4. Рисунок 3.4 показывает наличие двух "волн энергии", распространяющихся в противоположных направлениях. Максимумы распределения движутся с постоянной скоростью, равной ( $\sqrt{2} - 1$ ) $c_*$ .



Рис. 3.4: Эволюция начального прямоугольного распределения кинетической энергии (3.94) в скалярной квадратной решетке.

## Фундаментальное решение

Фундаментальное решение задачи о переносе энергии во всех двумерных скалярных решетках задается формулой (3.56). Для того чтобы получить решение для квадратной решетки, вычислим якобиан *G* с использованием формул (3.56) и (3.79):

$$G = -\frac{c_*^2 \left(\cos p_1 \sin^4 \frac{p_2}{2} + \cos p_2 \sin^4 \frac{p_1}{2}\right)}{4 \left(\sin^2 \frac{p_1}{2} + \sin^2 \frac{p_2}{2}\right)^2}.$$
(3.95)

Сделаем два последовательных преобразования в формулах (3.56), (3.95):  $s_1 = \sin^2 \frac{p_1}{2}$ ,  $s_2 = \sin^2 \frac{p_2}{2}$  and  $w = s_1 s_2$ ,  $q = s_1 + s_2$ . Тогда исключая w, получим:

$$T_{S} = \frac{A}{2(\pi c_{*}t)^{2}} \sum_{j} \frac{q_{j}}{|q_{j}^{2} - \tilde{r}^{2}(q_{j} + 1)|},$$

$$q_{j}^{3} - 2\left(\tilde{r}^{2} + 1\right)q_{j}^{2} + \left((\tilde{r}^{2} + 1)^{2} - 4\tilde{x}^{2}\tilde{y}^{2} + 1\right)q_{j} - 2\tilde{r}^{2} = 0,$$
(3.96)

где  $\tilde{r}^2 = 1 - \tilde{x}^2 - \tilde{y}^2$ ,  $\tilde{x} = \frac{x}{c_*t}$ ,  $\tilde{y} = \frac{y}{c_*t}$ . Суммирование ведется по всем вещественным корням  $q_j$  данного кубического уравнения, принадлежащим интервалу 0;2]. Формула (3.96) показывает, что функция  $Tc_*^2t^2/A$  является автомодельной. Формула (3.96) дает фундаментальное решение задачи о переносе кинетической энергии в скалярной квадратной решетке. В соответствии с формулой (3.96) энергия отлична от нуля в круге  $\tilde{x}^2 + \tilde{y}^2 \leq 1$  и имеет сингулярность на линии, определяемой уравнениями:

$$\tilde{x}^2 + \tilde{y}^2 = 1 - \frac{q^2}{q+1}, \qquad \tilde{x}^2 \tilde{y}^2 = \frac{2-q^2}{4(q+1)^2}.$$
(3.97)

Линия (3.97) показана на рис. 3.5. Она пересекает ось  $\tilde{x}$  в точках  $\pm(\sqrt{2}-1)$ . Оси  $\tilde{x}$  и  $\tilde{y}$ , совпадающие с базисными направлениями решетки, являются осями



Рис. 3.5: Фронт (окружность) и линия, на коротой энергия имеет особенность (формула (3.97)), соответствующие фундаментальному решению (3.96).

симметрии фундаментального решения (3.96). Решение для положительных  $\tilde{x}$ ,  $\tilde{y}$  показано на рис. 3.6. Таким образом, получено фундаментальное решение задачи о переносе энергии в скалярной квадратной решетке (формула (3.96)). Отметим аналогию полученного в данной работе результата (3.96) с результатами других авторов [150, 67]. В работах [150, 67], с использованием преобразования Вигнера получено пространственное распределение полной энергии, соответствующее фундаментальному решению уравнения движения (3.2). Данное распределение имеет вид, аналогичный распределению кинетической энергии,



Рис. 3.6: Фундаментальное решение (3.96) задачи о переносе энергии для скалярной квадратной решетки.

показанному на рис. 3.6. Следовательно, имеется аналогия между детерминированной задачей динамики решетки [150] и задачей о переносе энергии при случайных начальных условиях, рассматриваемой в настоящей работе.

#### Круговое начальное распределение кинетической энергии

Полученное выше решение задачи о переносе энергии верно в континуальном пределе. Для оценки границ применимости данного решения рассмотрим задачу, в которой начальная энергия равномерно распределена в круге радиуса Rи исследуем зависимость точности решения от радиуса. Континуальное решение должно терять точность, когда радиус круга станет порядка нескольких равновесных расстояний. Рассмотрим периодическую ячейку, содержащую  $N^2$ частиц, со следующим распределением начальной кинетической энергии:

$$T_0 = AH(R^2 - x^2 - y^2), (3.98)$$

где H — функция Хевисайда, A — константа. В случае R < a отлична от нуля только кинетическая энергия центральной частицы. Определим, при каком R начинает сказываться дискретность системы, т.е. континуальное решение (3.80) теряет точность. Будем рассматривать аналитическое выражение для энергии (3.80) и численное решение уравнений динамики. При этом во втором случае для вычисления кинетической энергии будем заменять математическое ожидание на среднее по конечному числу реализаций со случайными начальными условиями. Исследуем сходимость решения по количеству реализаций. Возьмем число частиц N = 300 и радиус круга R = 20a. Рассмотрим поле кинетической энергии в решетке в момент времени  $t = 15t_*$ , где  $t_*$  — период колебаний одной частицы на пружинке с жесткостью связи. Такой момент времени выбран таким образом, чтобы быстрые движения успели затухнуть и в то же время возмущение не успело дойти до границ ячейки периодичности. Отметим также, что решение задачи на больших временах становится почти самоподобным. Поэтому можно ограничиться рассмотрением одного момента времени.

Для численного интегрирования используется метод leap-frog с шагом  $t = 0.510^{-2}t_*$ . Такой сравнительно маленький шаг выбран в связи с тем, что моделируется достаточно быстрый процесс. При моделировании вычисляется кинетическая энергия каждой частицы в момент времени  $t = 15t_*$ . Поле энергии в случае осреднения по различному числу реализаций  $(10^1, 10^2, 10^3, 10^4)$  показано на рис. 3.7. Видно, что с увеличением числа реализаций наблюдается сходимость. Для сравнения построим поле кинетической энергии с использованием аналитической формулы (3.78). В данной формуле положим N = 300. Получающееся в результате распределение кинетической энергии приведено на рис. 3.8. Сравнение результатов, приведенных на рис. 3.7, 3.8, показывает, что аналитическое и численное решения практически совпадают.

Рассмотрим теперь зависимость результата от безразмерного радиуса начального возмущения R/a. Возьмем R/a = 0.5; 1.5; 2.5; 5. Отметим, что в случае R/a = 0.5 (отлична от нуля только кинетическая энергия центральной частицы). Соответствующие аналитическое и численное решения показаны на рис. 3.9, 3.10. При численном решении осреднение проводилось по 1000 реа-



Рис. 3.7: Перенос кинетической энергии в скалярной квадратной решетке при  $t = 15t_*$  в случае кругового распределения начальной энергии (R = 20a). Осреднение по различному числу реализаций. Шкала нормирована на начальное значение энергии в центре.



Рис. 3.8: Перенос кинетической энергии в скалярной квадратной решетке при  $t = 15T_0$  в случае кругового распределения начальной температуры (R = 20a). Показано аналитическое решение. Шкала нормирована на начальное значение энергии в центре.

лизаций. Видно, что аналитическое решение получается существенно более гладким, чем численное. По-видимому, это объясняется влиянием дискретности, которое становится заметным при  $R/a \sim 1$ .

## 3.2.6 Результаты параграфа 3.2

В настоящем параграфе развит подход к описанию баллистического переноса энергии в скалярных решетках. Выведено дифференциально-разностное уравнение относительно ковариаций скоростей частиц. Получено точное решение данного уравнения, описывающее, в частности, изменение поля кинетической энергии в произвольной гармонической скалярной решетке.

В точном уравнении для ковариаций проведена континуализация по пространственной переменной. Получено уравнение, приближенно описывающее перенос кинетической энергии. Поле энергии, получающееся в результате решения данного уравнения, представляется в виде суммы двух слагаемых (см.



Рис. 3.9: Аналитическое решение. Перенос кинетической энергии в скалярной квадратной решетке при  $t = 15T_0$  в случае кругового распределения начальной энергии (R = 20a). Температурная шкала нормирована на начальное значение температуры.

формулы (3.43), (3.45), (3.46)). Первое слагаемое описывает поведение на малых временах, когда в решетке происходят переходные процессы, рассмотренные в предыдущей главе. На малых временах кинетическая энергия совершает затухающие высокочастотные колебания, связанные с уравниванием кинетической и потенциальной энергий. Данные колебания в различных пространственных точках происходят независимо. На больших временах первое слагаемое стремится к нолю. Второе слагаемое описывает изменение кинетической энергии, связанное с баллистическим переносом. На больших временах кинетическая энергия представляется в виде суперпозиции волн, распространяющихся с груп-



Рис. 3.10: Численное решение. Перенос кинетической энергии в скалярной квадратной решетке при  $t = 15T_0$  в случае кругового распределения начальной энергии. Температурная шкала нормирована на начальное значение температуры.

повыми скоростями и имеющими форму начального распространения энергии. При этом, как правило, имеется фронт, распространяющийся с максимальной групповой скоростью. Данные результаты согласуются с результатами других авторов, полученными в работе [150] с использованием другого подхода. Получены фундаментальные решения задачи о переносе энергии для одномерных и двумерных скалярных решеток.

Отметим, что точное и приближенное выражения для кинетической энергии, полученные в данном параграфе, обладают тем же свойством, что и уравнения движения: они симметричны относительно времени, т.е. замены  $t \to -t$ . В то же время процессы в бесконечных решетках необратимы. В частности, необратимость хорошо видна в решении задачи о затухании синусоидального профиля в квадратной решетке, совершающей поперечные колебания. Решение показывает, что амплитуда синусоидального профиля затухает обратно пропорционально времени.

Для примера решен ряд задач для скалярной квадратной решетки. Во всех задачах проводилось сравнение аналитического решения с результатами численного интегрирования уравнений движения решетки. Показано, что поведение кинетической энергии с высокой точностью описывается полученными формулами. Результаты, полученные в данном параграфе, опубликованы в работе [109].

# 3.3 Перенос энергии в упругих телах со сложной кристаллической решеткой

В настоящем параграфе предлагается подход к описанию переноса энергии в сложных кристаллических решетках с произвольным числом степеней свободы элементарной ячейки. При этом используется матричная запись уравнений динамики, введенная в параграфе 2.3. Основное отличие от предыдущего параграфа состоит в том, что для описания переноса энергии используется точное решение уравнений динамики.

## 3.3.1 Уравнения движения и начальные условия

В настоящем параграфе приводится описание используемой модели деформируемого твердого тела, частично повторяющее материал параграфа 2.3.

Рассматриваются бесконечные кристаллы со сложной решеткой в пространстве размерности d = 1, 2, 3. Все выкладки проводятся для кристаллов, элементарная ячейка которых содержит произвольное число частиц. Как и ранее, элементарные ячейки идентифицируются их радиус-векторами **x** в недеформированном состоянии решетки. Каждая элементарная ячейка имеет N степеней свободы  $u_i(\mathbf{x}), i = 1, ..., N$ , соответствующих компонентам перемещений частиц данной ячейки (N равно произведению числа частиц в ячейке на число степеней свободы одной частицы). Компоненты перемещений формируют векторстолбец:

$$\boldsymbol{u}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} u_1 & u_2 & \dots & u_N \end{bmatrix}^\top, \qquad (3.99)$$

где ⊤ обозначает транспонирование. Здесь и далее матрицы обозначаются наклонными жирными символами, а трехмерные векторы, например, радиусвекторы — прямыми жирными символами.

Частицы из ячейки **x** взаимодействуют друг с другом и с частицами из других ячеек, пронумерованных индексом  $\alpha$ . Вектор, соединяющий ячейку **x** с ее соседом номер  $\alpha$ , обозначается  $\mathbf{a}_{\alpha}$ . Центры элементарных ячеек всегда формируют простую решетку (решетка называется простой, если она переходит в себя при сдвиге на вектор, соединяющий любые два узла). Следовательно, нумерация может быть осуществлена таким образом, что векторы  $\mathbf{a}_{\alpha}$  удовлетворяют соотношению:

$$\mathbf{a}_{\alpha} = -\mathbf{a}_{-\alpha}.\tag{3.100}$$

Здесь  $\mathbf{a}_0 = 0$ . Пример векторов  $\mathbf{a}_{\alpha}$  показан на рисунке 3.11.



Рис. 3.11: Пример двумерного кристалла со сложной решеткой, имеющей три подрешетки. Частицы, принадлежащие разным подрешеткам, имеют разный цвет и размер.

Бесконечный кристалл рассматривается как предел кристалла с периодическими граничными условиями при стремлении размеров ячейки периодичности к бесконечности. Пусть периодическая ячейка содержит  $n^d$  элементарных ячеек (*n* в каждом направлении). Тогда перемещения частиц удовлетворяют периодическим граничным условиям:

$$\boldsymbol{u}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{u}\left(\mathbf{x} + \sum_{j=1}^{d} C_j n \mathbf{b}_j\right),$$
 (3.101)

где  $\mathbf{b}_j$  — базисные векторы решетки;  $C_j$  — целые числа. Дальнейшие аналитические выкладки проводятся при  $n \to \infty$ , в то время как в компьютерном моделировании *n* конечно.

Будем использовать общий вид уравнений движения, предложенный в параграфе 2.3. В гармоническом приближении полная сила, действующая на каждую частицу, представима в виде линейной комбинации перемещений всех остальных частиц. С использованием данного факта уравнения движения можно записать в виде:

$$\boldsymbol{M}\dot{\boldsymbol{v}}(\mathbf{x}) = \sum_{\alpha} \boldsymbol{C}_{\alpha} \boldsymbol{u}(\mathbf{x} + \mathbf{a}_{\alpha}), \qquad \boldsymbol{C}_{\alpha} = \boldsymbol{C}_{-\alpha}^{\top},$$
 (3.102)

где  $\boldsymbol{v} = \dot{\boldsymbol{u}}; \, \boldsymbol{u}(\mathbf{x} + \mathbf{a}_{\alpha}) -$ столбец перемещений частиц элементарной ячейки  $\alpha;$  $\boldsymbol{M}$  — диагональная матрица размерности  $N \times N$ , состоящая из масс частиц; коэффициенты матрицы  $\boldsymbol{C}_{\alpha}$  определяют жесткости пружинок, соединяющих частицы из ячейки  $\mathbf{x}$  с частицами из соседней частицы  $\alpha$ ; матрица  $\boldsymbol{C}_0$  описывает взаимодействия частиц внутри ячейки  $\mathbf{x}$ . Также матрица  $\boldsymbol{C}_0$  может учитывать взаимодействие с линейным упругим основанием. Суммирование проводится по всем ячейкам,  $\alpha$ , взаимодействующим с ячейкой  $\mathbf{x}$  (включая  $\alpha = 0$ ).

Соотношение  $C_{\alpha} = C_{-\alpha}^{\top}$  является достаточным условием того, что динамическая матрица системы (3.108) Эрмитова (см. параграф 3.3.2).

Формула (3.102) описывает динамику простых и сложных кристаллов в од-

номерном, двумерном и трехмерном случаях. Для N = 1 (одна степень свободы на элементарную ячейку) уравнение (3.102) описывает движение так называемых скалярных решеток, рассмотренных в предыдущем параграфе. Простые двумерные и трехмерные решетки описываются уравнением (3.102) при N = dи  $C_{\alpha} = C_{\alpha}^{\top}$ . В настоящей главе для примера рассматриваются сложные решетки с двумя частицами на элементарную ячейку, а именно одномерная двухатомная цепочка (параграф 3.3.6.1) и двумерная гексагональная решетка (параграф 3.3.6.2).

Для задания начального распределения энергии в системе используются следующие начальные условия:

$$\boldsymbol{u}(\mathbf{x}) = 0, \quad \boldsymbol{v}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{v}_0(\mathbf{x}),$$
 (3.103)

Здесь  $\boldsymbol{v}_0(\mathbf{x})$  — столбец случайных начальных скоростей частиц ячейки **x**. Скорости задаются так, что

$$\langle \boldsymbol{v}_0(\mathbf{x}) \rangle = 0, \qquad \langle \boldsymbol{v}_0(\mathbf{x}) \boldsymbol{v}_0(\mathbf{y}) \rangle = \boldsymbol{B}(\mathbf{x}) \delta_D(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \qquad (3.104)$$

где  $\langle ... \rangle$  — математическое ожидание (в компьютерном моделировании математическое ожидание заменяется средним по реализациям со случайными начальными условиями);  $\delta_D(0) = 1$ ;  $\delta_D(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = 0$  для  $\mathbf{x} \neq \mathbf{y}$ . Другими словами, компоненты столбца  $\boldsymbol{v}_0(\mathbf{x})$  — случайные числа с нулевым математическим ожиданием и, вообще говоря, разными дисперсиями, заданными диагональными элементами матрицы  $\boldsymbol{B}(\mathbf{x})$ . Внедиагональные элементы матрицы  $\boldsymbol{B}(\mathbf{x})$  равны ковариациям начальных скоростей, соответствующих различным степеням свободы элементарной ячейки  $\mathbf{x}$ . Начальные скорости частиц из различных ячеек статистически независимы.

С макроскопической точки зрения начальные условия (3.103), (3.104) задают ют некоторый профиль начальной кинетической энергии (см.формулы (3.115), (3.116)) и нулевые начальные тепловые потоки. Поток энергии в решетке пропорционален математическому ожиданию произведения скорости и силы взаимодействия (см. например работу [244]). Поэтому начальные потоки равны нулю.

Примеры начальных условий (3.103), (3.104) даны формулами (3.183), (3.197). В случае если кинетическая энергия частиц интерпретируется как энергия теплового движения, начальные условия (3.103), (3.104) могут рассматриваться как результат нагрева кристалла ультракоротким лазерным импульсом [80, 234, 87, 169, 174].

В следующем параграфе получается точное решение уравнений (3.102) с начальными условиями (3.103), которое далее используется для описания переноса энергии.

## 3.3.2 Точное решение уравнений движения

В настоящем параграфе получается точное решение уравнений (3.102) с начальными условиями (3.103), (3.104) с использованием дискретного преобразования Фурье. Преобразование проводится по целым компонентам вектора **х**.

Радиус-вектор элементарной ячейки х представляется в виде

$$\mathbf{x} = \sum_{j=1}^{d} z_j \mathbf{b}_j,\tag{3.105}$$

где  $\mathbf{b}_j, j = 1, ..., d$  — базисные векторы;  $z_1, ..., z_d$  — целые числа, которые можно использовать в качестве индексов элементарной ячейки; d — размерность пространства. Прямое и обратное дискретное преобразование Фурье по переменным  $z_1, .., z_d$  для бесконечной решетки определяются формулой

$$\hat{\boldsymbol{u}}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{x}} \boldsymbol{u}(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}, \qquad \mathbf{k} = \sum_{j=1}^{d} p_j \tilde{\mathbf{b}}_j,$$

$$\boldsymbol{u}(\mathbf{x}) = \int_{\mathbf{k}}^{\mathbf{x}} \hat{\boldsymbol{u}}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} dp_1..dp_d.$$
(3.106)

Здесь  $\hat{\boldsymbol{u}}(\mathbf{k}) - \Phi$ урье-образ  $\boldsymbol{u}$ ;  $\mathbf{i}^2 = -1$ ;  $\mathbf{k}$  — волновой вектор;  $\tilde{\mathbf{b}}_j$  — базисные векторы обратной решетки такие, что  $\mathbf{b}_i \cdot \tilde{\mathbf{b}}_j = \delta_{ij}$ , где  $\delta_{ij}$  — символ Кронекера. Для краткости далее используется обозначение:

$$\int_{\mathbf{k}} \dots d\mathbf{k} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{(2\pi)^d} \int_0^{2\pi} \dots \int_0^{2\pi} \dots dp_1 \dots dp_d, \qquad \sum_{\mathbf{x}} \dots \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{z_1 = -\infty}^{+\infty} \dots \sum_{z_d = -\infty}^{+\infty} \dots \quad (3.107)$$

Применяя дискретное преобразование Фурье (3.153) к формулам (3.102), (3.103), (3.104), получим уравнение

$$\boldsymbol{M}^{\frac{1}{2}}\ddot{\boldsymbol{u}} = -\boldsymbol{\Omega}\boldsymbol{M}^{\frac{1}{2}}\hat{\boldsymbol{u}}, \qquad \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k}) = -\sum_{\alpha}\boldsymbol{M}^{-\frac{1}{2}}\boldsymbol{C}_{\alpha}\boldsymbol{M}^{-\frac{1}{2}}e^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_{\alpha}}, \qquad (3.108)$$

с начальными условиями

$$\hat{\boldsymbol{u}} = 0, \qquad \dot{\hat{\boldsymbol{u}}} = \hat{\boldsymbol{v}}_0 = \sum_{\mathbf{x}} \boldsymbol{v}_0(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}.$$
 (3.109)

Матрица  $\boldsymbol{\Omega}$  в формуле (3.108) совпадает с динамической матрицей решетки, введенной в главе 2. Здесь  $\boldsymbol{M}^{\frac{1}{2}} \boldsymbol{M}^{\frac{1}{2}} = \boldsymbol{M}.$ 

Для того чтобы упростить уравнение (3.108), воспользуемся тем, что динамическая матрица  $\Omega$  — Эрмитова, т.е. не меняется при транспонировании с комплексным сопряжением. Тогда динамическая матрица представляется в виде

$$\boldsymbol{\Omega} = \boldsymbol{P} \boldsymbol{\Lambda} \boldsymbol{P}^{*\top}, \qquad \Lambda_{ij} = \omega_j^2 \delta_{ij}, \qquad (3.110)$$

где  $\omega_j^2, j=1,..,N-$  собственные числа матрицы  $oldsymbol{\Omega},$  а  $\omega_j({f k})-$  ветки дисперси-

онного соотношения данной решетки (далее рассматриваются только неотрицательные частоты  $\omega_j(\mathbf{k}) \geq 0$ ); \* обозначает комплексное сопряжение; матрицы  $\boldsymbol{P}$ составлена из нормированных собственных векторов матрицы  $\boldsymbol{\Omega}$ . Матрица  $\boldsymbol{P}$ является унитарной, т.е.  $\boldsymbol{P}\boldsymbol{P}^{*\top} = \mathbf{E}$ , где  $\mathbf{E}$  — единичная матрица. Собственные векторы иногда называются векторами поляризации [32].

Предполагается, что ветки дисперсионного соотношения почти нигде не пересекаются, т.е. все собственные числа динамической матрицы *Ω* различны. Случай пересекающихся ветвей должен рассматриваться отдельно.

Подставим формулу (3.110) в уравнение (3.108), домножим обе части на  $P^{*\top}$ и введем новую переменную  $w = P^{*\top} M^{\frac{1}{2}} \hat{u}$ . Тогда получим систему несвязанных уравнений для элементов  $w_i$  вектора w:

$$\ddot{\boldsymbol{w}} = -\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{w} \quad \Leftrightarrow \quad \ddot{w}_j = -\omega_j^2 w_j.$$
 (3.111)

Решая данные уравнения с начальными условиями (3.109), получим выражение для  $\dot{\boldsymbol{w}}$ :

$$\dot{w}_{j} = \{ \boldsymbol{P}^{*\top} \boldsymbol{M}^{\frac{1}{2}} \hat{\boldsymbol{v}}_{0} \}_{j} \cos(\omega_{j} t) \quad \Leftrightarrow \quad \dot{\boldsymbol{w}} = \boldsymbol{D} \boldsymbol{P}^{*\top} \boldsymbol{M}^{\frac{1}{2}} \hat{\boldsymbol{v}}_{0},$$

$$D_{ij}(\mathbf{k}, t) = \cos(\omega_{j}(\mathbf{k}) t) \,\delta_{ij}.$$
(3.112)

Здесь {...}<sub>j</sub> обозначает *j*ый элемент столбца. Тогда, используя определение матрицы **w**, представим Фурье-образы скоростей в виде:

$$\hat{\boldsymbol{v}} = \boldsymbol{M}^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{P} \boldsymbol{D} \boldsymbol{P}^{*\top} \boldsymbol{M}^{\frac{1}{2}} \hat{\boldsymbol{v}}_{0}.$$
(3.113)

Применяя в формуле (3.113) обратное дискретное преобразование Фурье, получим следующее выражение для скоростей:

$$\boldsymbol{v}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{M}^{-\frac{1}{2}} \int_{\mathbf{k}} \boldsymbol{P} \boldsymbol{D} \boldsymbol{P}^{*\top} \boldsymbol{M}^{\frac{1}{2}} \hat{\boldsymbol{v}}_{0} e^{\mathbf{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} d\mathbf{k}, \qquad (3.114)$$

где  $\hat{\boldsymbol{v}}_0 - \Phi$ урье-образ столбца начальных скоростей (см. формулу (3.109)).

Таким образом, формула (3.114) дает точное решение уравнения динамики (3.102) с начальными условиями (3.103). В следующих параграфах решение (3.114) используется для вычисления поля кинетической энергии в кристалле.

## 3.3.3 Перенос кинетических энергий (точная формула)

В силу случайности начальных условий (3.103), (3.104) скорости частиц (3.114) также являются случайными. Для того чтобы ввести статистические характеристики, такие как математическое ожидание кинетической энергии, рассматривается бесконечное множество реализаций начальных условий (3.103), (3.104).

В главе 2 было показано, что в гармонических кристаллах кинетические энергии, соответствующие разным степеням свободы, вообще говоря, различны. Поэтому для описания распределения энергий по степеням свободы элементарной ячейки **x** используется матрица  $T(\mathbf{x})$  размерности  $N \times N$ :

$$\boldsymbol{T}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \boldsymbol{M}^{\frac{1}{2}} \left\langle \boldsymbol{v}(\mathbf{x}) \boldsymbol{v}(\mathbf{x})^{\top} \right\rangle \boldsymbol{M}^{\frac{1}{2}} \quad \Leftrightarrow \quad 2T_{ij} = \sqrt{M_i M_j} \left\langle v_i v_j \right\rangle, \quad (3.115)$$

где  $M^{\frac{1}{2}}M^{\frac{1}{2}} = M$ ;  $M_i - i$ ый элемент матрицы M, равный массе, соответствующей *i*ой степени свободы элементарной ячейки. Диагональный элемент  $T_{ii}$  равен кинетической энергии, соответствующей *i*ой степени свободы элементарной ячейки. Внедиагональный элемент  $T_{ij}$  характеризует корреляцию между компонентами i, j столбца скоростей  $v(\mathbf{x})$ .

Также используется кинетическая энергия ячейки Т:

$$T(\mathbf{x}) = \frac{1}{N} \operatorname{tr} \boldsymbol{T}(\mathbf{x}), \qquad (3.116)$$

где N — число степеней свободы элементарной ячейки, tr(..) — след (сумма

диагональных элементов) матрицы. В случае, если кинетическая энергия равномерно распределена по степеням свободы элементарной ячейки, все кинетические энергии  $T_{ii}$  равны T.

Далее на основе решения уравнений движения (3.114) выводится точное выражение для матрицы **T**. Подстановка решения (3.114) в определение (3.115) дает:

$$2\boldsymbol{T}(\mathbf{x}) = \int_{\mathbf{k}_1} \int_{\mathbf{k}_2} \boldsymbol{P}_1 \boldsymbol{D}_1 \boldsymbol{P}_1^{*\top} \boldsymbol{M}^{\frac{1}{2}} \Big\langle \hat{\boldsymbol{v}}_0(\mathbf{k}_1) \hat{\boldsymbol{v}}_0(\mathbf{k}_2)^{*\top} \Big\rangle \boldsymbol{M}^{\frac{1}{2}} \boldsymbol{P}_2 \boldsymbol{D}_2 \boldsymbol{P}_2^{*\top} e^{i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{x}} \mathrm{d} \mathbf{k}_1 \mathrm{d} \mathbf{k}_2.$$
(3.117)

Здесь и далее  $\boldsymbol{P}_j = \boldsymbol{P}(\mathbf{k}_j), \ \boldsymbol{D}_j = \boldsymbol{D}(\mathbf{k}_j), \ j = 1, 2.$  При выводе использовались следующие тождества:  $\int_{\mathbf{k}} \boldsymbol{F}(\mathbf{k}) d\mathbf{k} \int_{\mathbf{k}} \boldsymbol{F}^{*\top}(\mathbf{k}) d\mathbf{k} = \int_{\mathbf{k}_1} \int_{\mathbf{k}_2} \boldsymbol{F}(\mathbf{k}_1) \boldsymbol{F}^{*\top}(\mathbf{k}_2) d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2$  и  $\mathbf{v} = \mathbf{v}^*.$ 

Начальные условия (3.103), (3.104) такие, что начальные скорости элементарных ячеек  $\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2$  статистически независимы, следовательно выполняется соотношение

$$\left\langle \boldsymbol{v}_{0}(\mathbf{y}_{1})\boldsymbol{v}_{0}(\mathbf{y}_{2})^{*\top}\right\rangle = 2\boldsymbol{M}^{-\frac{1}{2}}\boldsymbol{T}_{0}(\mathbf{y}_{1})\delta_{D}(\mathbf{y}_{1}-\mathbf{y}_{2})\boldsymbol{M}^{-\frac{1}{2}}.$$
 (3.118)

Здесь  $T_0$  — начальное значение матрицы T, которое может быть получено подстановкой начальных скоростей,  $v_0(\mathbf{x})$ , в формулу (3.115);  $\delta_D$  определена после формулы (3.104). С использованием соотношения (3.118) проведем следующие преобразования:

$$\left\langle \hat{\boldsymbol{v}}_{0}(\mathbf{k}_{1})\hat{\boldsymbol{v}}_{0}(\mathbf{k}_{2})^{*\top} \right\rangle = \sum_{\mathbf{y}_{1},\mathbf{y}_{2}} \left\langle \boldsymbol{v}_{0}(\mathbf{y}_{1})\boldsymbol{v}_{0}(\mathbf{y}_{2})^{*\top} \right\rangle e^{-\mathrm{i}(\mathbf{k}_{1}\cdot\mathbf{y}_{1}-\mathbf{k}_{2}\cdot\mathbf{y}_{2})} =$$

$$= 2\sum_{\mathbf{y}} \boldsymbol{M}^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{T}_{0}(\mathbf{y}) \boldsymbol{M}^{-\frac{1}{2}} e^{-\mathrm{i}(\mathbf{k}_{1}-\mathbf{k}_{2})\cdot\mathbf{y}}.$$

$$(3.119)$$

Тогда подстановка (3.119) в формулу (3.117) дает:

$$\boldsymbol{T}(\mathbf{x},t) = \int_{\mathbf{k}_1} \int_{\mathbf{k}_2} \sum_{\mathbf{y}} \boldsymbol{P}_1 \boldsymbol{D}_1 \boldsymbol{P}_1^{*\top} \boldsymbol{T}_0(\mathbf{y}) \boldsymbol{P}_2 \boldsymbol{D}_2 \boldsymbol{P}_2^{*\top} e^{\mathrm{i}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y})} \mathrm{d}\mathbf{k}_1 \mathrm{d}\mathbf{k}_2. \quad (3.120)$$

Формула (3.120) дает точные выражения для кинетических энергий, соответствующих степеням свободы ячейки. Отметим, что данная формула симметрична относительно времени, т.е. инвариантна относительно замены t на -t. Аналогичным свойством обладают уравнения движения (3.102).

Матрица  $\boldsymbol{T}$  в точности представима в виде суммы "быстрого" и "медленного" слагаемых:

$$T = T_F + T_S, \qquad T_F(\mathbf{x}) = \int_{\mathbf{k}_1} \int_{\mathbf{k}_2} \sum_{\mathbf{y}} \mathbf{P}_1 \mathbf{T}'_F \mathbf{P}_2^{*\top} e^{i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y})} d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2,$$
  

$$T_S(\mathbf{x}) = \int_{\mathbf{k}_1} \int_{\mathbf{k}_2} \sum_{\mathbf{y}} \mathbf{P}_1 \mathbf{T}'_S \mathbf{P}_2^{*\top} e^{i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y})} d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2,$$
  

$$\{\mathbf{T}'_F\}_{ij} =$$
  

$$= \frac{1}{2} \{\mathbf{P}_1^{*\top} \mathbf{T}_0(\mathbf{y}) \mathbf{P}_2\}_{ij} [\cos((\omega_i(\mathbf{k}_1) + \omega_j(\mathbf{k}_2))t) + (1 - \delta_{ij}) \cos((\omega_i(\mathbf{k}_1) - \omega_j(\mathbf{k}_2))t)],$$
  

$$\{\mathbf{T}'_S\}_{ij} = \frac{1}{2} \{\mathbf{P}_1^{*\top} \mathbf{T}_0(\mathbf{y}) \mathbf{P}_2\}_{ij} \delta_{ij} \cos(((\omega_j(\mathbf{k}_1) - \omega_j(\mathbf{k}_2))t)).$$
  
(3.121)

Здесь  $\{...\}_{ij}$  — элемент матрицы с индексами i, j. Представление (3.121) основано на том, что  $T_F$  и  $T_S$  имеют разные характерные временные масштабы. Разница временных масштабов наиболее наглядно демонстрируется примером, рассмотренным в параграфе 3.3.4.5. Физический смысл величин  $T_F$ ,  $T_S$  обсуждается ниже.

Видно, что формулы (3.120), (3.121) для матрицы T достаточно сложны для анализа и вычислений, т.к. содержат двойное интегрирование по волновым векторам  $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2$  и суммирование по всем элементарным ячейкам. Поэтому в следующем параграфе предлагается более простая приближенная формула.

#### 3.3.3.1 Пример. Одноатомная одномерная цепочка

Для примера рассмотрим простейший частный случай — одномерную цепочку, состоящую из одинаковых частиц. Элементарная ячейка такой решетки содержит одну частицу с одной степенью свободы (N = 1). Каждая частица соединена с произвольным числом соседей линейными пружинками. В таком случае матрица **T** содержит всего один элемент, равный кинетической энергии, T(x,t). Формула (3.120) дает:

$$T(x,t) = \sum_{y} T_0(y) \int_{k_1} \int_{k_2} \cos(\omega(k_1)t) \cos(\omega(k_2)t) \cos((k_1 - k_2)(x - y)) dk_1 dk_2.$$
(3.122)

В соответствии с формулой (3.121) "быстрые" и "медленные" составляющие определяются выражениями:

$$T_F(x,t) = \sum_y \frac{T_0(y)}{2} \int_{k_1} \int_{k_2} \cos\left(\left(\omega(k_1) + \omega(k_2)\right) t\right) \cos\left(\left(k_1 - k_2\right)(x - y)\right) dk_1 dk_2,$$
  

$$T_S(x,t) = \sum_y \frac{T_0(y)}{2} \int_{k_1} \int_{k_2} \cos\left(\left(\omega(k_1) - \omega(k_2)\right) t\right) \cos\left(\left(k_1 - k_2\right)(x - y)\right) dk_1 dk_2.$$
(3.123)

Двойной интеграл в правой части определяет вклад частицы y в энергию частицы x. Он представляет собой суперпозицию волн с волновыми числами  $k_1 - k_2$  и частотами  $\omega(k_1) + \omega(k_2)$  (в быстром слагаемом),  $\omega(k_1) - \omega(k_2)$  (в медленном слагаемом).

## 3.3.4 Перенос кинетической энергии (континуальное описание)

В настоящем параграфе выводится формула, описывающая перенос кинетических энергий в кристалле в континуальном приближении.

Одним из основных результатов данной главы является следующая прибли-

женная формула для матрицы **Т**:

$$T = T_F + T_S, \qquad T_F \approx \int_{\mathbf{k}} P \tilde{T}_F P^{*\top} d\mathbf{k}, \qquad T_S \approx \int_{\mathbf{k}} P \tilde{T}_S P^{*\top} d\mathbf{k},$$
$$\{\tilde{T}_F\}_{ij} = \frac{1}{2} \{ P^{*\top} T_0(\mathbf{x}) P \}_{ij} \left[ \cos((\omega_i + \omega_j)t) + (1 - \delta_{ij}) \cos((\omega_i - \omega_j)t) \right],$$
$$\{\tilde{T}_S\}_{ij} = \frac{1}{4} \{ P^{*\top} \left( T_0(\mathbf{x} + \mathbf{v}_g^j t) + T_0(\mathbf{x} - \mathbf{v}_g^j t) \right) P \}_{jj} \delta_{ij}.$$
(3.124)

Здесь  $\mathbf{P} = \mathbf{P}(\mathbf{k}); \mathbf{v}_g^j$  — групповая скорость, соответствующая *j*ой ветке дисперсионного соотношения  $\omega_j$ :

$$\mathbf{v}_{g}^{j} = \frac{\mathrm{d}\omega_{j}}{\mathrm{d}\mathbf{k}} = \sum_{i=1}^{d} \frac{\partial\omega_{j}}{\partial p_{i}} \mathbf{b}_{i}, \qquad \mathbf{k} = \sum_{i=1}^{d} p_{i} \tilde{\mathbf{b}}_{i}. \tag{3.125}$$

В формуле (3.125) используются положительные частоты  $\omega_j$ , j = 1, ..., N. Формула (3.124) существенно проще и удобнее для аналитических выкладок и вычислений, чем точная формула (3.121), т.к. формула (3.124) содержит только один интеграл по волновому вектору **k** и не содержит суммирования по элементарным ячейкам.

Функция  $T_0$  изначально была определена на дискретном множестве точек, соответствующих положениям элементарных ячеек **x** (см. формулу (3.115)). В то же время аргумент данной функции  $\mathbf{x} \pm \mathbf{v}_g^j t$  непрерывно меняется в пространстве. Поэтому далее предполагается, что  $T_0$  может быть определена для всего пространства таким образом, что в точках **x** она совпадает со значениями, данными формулой (3.115).

Первое слагаемое  $T_F$  в формуле (3.124) описывает поведение кинетических энергий на малых временах (быстрый процесс [240, 109]). На малых временах происходят осцилляции, вызванные процессами, которые рассматривались в главе 2: перераспределением энергии между кинетической и потенциальной формами и перераспределением энергии по степеням свободы. Данные колебания в различных пространственных точках происходят независимо. На больших временах  $T_F$  стремится к нулю.

Второе слагаемое  $T_S$  в формуле (3.124) описывает поведение кинетических энергий на больших временах (медленный процесс [244, 103, 109]). На больших временах изменения кинетической энергии вызваны баллистическим переносом. Матрица T представлена в виде суперпозиции волн, имеющих форму, определяемую начальным распределением энергии, и распространяющихся с групповыми скоростями  $\mathbf{v}_g^j(\mathbf{k})$ . Отметим, что в соответствии с формулой (3.124) для описания баллистического переноса энергии необходимо знание полного дисперсионного соотношения и соответствующих групповых скоростей.

В формуле (3.121) энергия ячейки **x** в любой момент времени зависит от энергий всех остальных ячеек. Данный факт является следствием бесконечной скорости распространения возмущений в дискретных системах, описываемых уравнениями движения (3.102). Приближенная формула (3.124) не содержит данного артефакта. В соответствии с формулой (3.124) энергия ячейки **x** в момент t зависит от энергий ячеек, находящихся от ячейки **x** на расстоянии, не превосходящем  $\max_{\mathbf{k},j} (|\mathbf{v}_g^j|) t$ .

Сравнение формулы (3.124) с результатами, полученными в предыдущей главе, показывает, что  $T_S(\mathbf{x})$  при t = 0 совпадает с равновесным значением матрицы T в кристалле с однородным распределением энергии.

Рассмотрим теперь вывод приближенной формулы (3.124). Вывод основан на предположении, что основной вклад в интегралы  $T_F$ ,  $T_S$  дают точки с близкими волновыми векторами  $\mathbf{k}_1 \approx \mathbf{k}_2$ . Строгое обоснование данного предположения приведено в параграфе 3.3.5 на примере одномерных цепочек.

Выражение для  $T_F$  в формуле (3.124) выводится следующим образом. Введем в формуле (3.121) для  $T_F$  новые переменные

$$\mathbf{p}_1 = \mathbf{k}_1, \qquad \mathbf{p}_2 = \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2.$$
 (3.126)

Якобиан данного преобразования равен единице. Используя периодичность

подынтегрального выражения в формуле (3.121), можно показать, что интегрирование проводится по той же области, что и в формуле (3.107). Предполагается, что основной вклад в интеграл (3.124) дается точками  $\mathbf{p}_2 \approx 0$  ( $\mathbf{k}_1 \approx \mathbf{k}_2$ ). Тогда подынтегральное выражение можно разложить в ряд по  $\mathbf{p}_2$ . В частности используются следующие приближенные формулы:

$$\boldsymbol{P}(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) \approx \boldsymbol{P}(\mathbf{p}_1), \qquad \omega_i(\mathbf{p}_1) \pm \omega_j(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) \approx \omega_i(\mathbf{p}_1) \pm \omega_j(\mathbf{p}_1), \qquad (3.127)$$

где  $i \neq j$ . Тогда формула (3.121) для  $\boldsymbol{T}_F$  принимает вид

$$\boldsymbol{T}_{F} \approx \int_{\mathbf{p}_{1}} \boldsymbol{P} \int_{\mathbf{p}_{2}} \sum_{\mathbf{y}} \tilde{\boldsymbol{T}}_{F}(\mathbf{y}, \mathbf{p}_{1}) e^{i\mathbf{p}_{2} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y})} d\mathbf{p}_{2} \boldsymbol{P}^{*\top} d\mathbf{p}_{1}, \qquad \boldsymbol{P} = \boldsymbol{P}(\mathbf{p}_{1}),$$

$$\{\tilde{\boldsymbol{T}}_{F}\}_{ij} = \frac{1}{2} \{\boldsymbol{P}^{*\top} \boldsymbol{T}_{0}(\mathbf{y}) \boldsymbol{P}\}_{ij} \left[ \cos((\omega_{i}(\mathbf{p}_{1}) + \omega_{j}(\mathbf{p}_{1}))t) + (1 - \delta_{ij}) \cos((\omega_{i}(\mathbf{p}_{1}) - \omega_{j}(\mathbf{p}_{1}))t) \right].$$
(3.128)

По определению дискретного преобразования Фурье выполняется

$$\int_{\mathbf{p}_2} \sum_{\mathbf{y}} \tilde{\boldsymbol{T}}_F(\mathbf{y}, \mathbf{p}_1) e^{\mathrm{i}\mathbf{p}_2 \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y})} \mathrm{d}\mathbf{p}_2 = \tilde{\boldsymbol{T}}_F(\mathbf{x}, \mathbf{p}_1).$$
(3.129)

Подстановка данного соотношения в формулу (3.128) дает выражение для  $T_F$  в формуле (3.124).

Для вывода приближенного выражения для  $T_S$  в формуле (3.124), в формуле (3.121) также вводятся новые переменные (3.126). Подынтегральное выражение в формуле (3.121) раскладывается в ряд по  $\mathbf{p}_2$ . В частности, используются соотношения:

$$\boldsymbol{P}(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) \approx \boldsymbol{P}(\mathbf{p}_1), \qquad \omega_j(\mathbf{p}_1) - \omega_j(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) \approx \mathbf{p}_2 \cdot \mathbf{v}_g^j(\mathbf{p}_1), \qquad (3.130)$$

где  $\mathbf{v}_g^j$  — групповая скорость (3.124). Тогда формула (3.121) для  $\boldsymbol{T}_S$  принимает

вид

$$\boldsymbol{T}_{S} \approx \int_{\mathbf{p}_{1}} \int_{\mathbf{p}_{2}} \sum_{\mathbf{y}} \boldsymbol{P} \tilde{\boldsymbol{T}}_{S}(\mathbf{y}) \boldsymbol{P}^{*\top} e^{i\mathbf{p}_{2} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y})} d\mathbf{p}_{2} d\mathbf{p}_{1}, \qquad \boldsymbol{P} = \boldsymbol{P}(\mathbf{p}_{1}),$$

$$\{\tilde{\boldsymbol{T}}_{S}\}_{ij} \approx \frac{1}{2} \{\boldsymbol{P}^{*\top} \boldsymbol{T}_{0}(\mathbf{y}) \boldsymbol{P}\}_{ij} \delta_{ij} \cos(\mathbf{p}_{2} \cdot \mathbf{v}_{g}^{j}(\mathbf{p}_{1})t).$$

$$(3.131)$$

С использованием тождества  $2\cos(\mathbf{p}_2\cdot\mathbf{v}_g^jt) = e^{i\mathbf{p}_2\cdot\mathbf{v}_g^jt} + e^{-i\mathbf{p}_2\cdot\mathbf{v}_g^jt}$  и свойств дискретного преобразования Фурье, можно показать, что

$$\int_{\mathbf{p}_{2}} \sum_{\mathbf{y}} \{ \boldsymbol{P}^{*\top} \boldsymbol{T}_{0}(\mathbf{y}) \boldsymbol{P} \}_{jj} \cos(\mathbf{p}_{2} \cdot \mathbf{v}_{g}^{j} t) e^{i\mathbf{p}_{2} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y})} d\mathbf{p}_{2} = \frac{1}{2} \{ \boldsymbol{P}^{*\top} \left( \boldsymbol{T}_{0}(\mathbf{x} + \mathbf{v}_{g}^{j} t) + \boldsymbol{T}_{0}(\mathbf{x} - \mathbf{v}_{g}^{j} t) \right) \boldsymbol{P} \}_{jj}.$$
(3.132)

Подстановка формулы (3.132) в формулу (3.131) дает выражение для  $T_S$  в формуле (3.124).

Более строгий вывод формулы (3.124) выходит за рамки данной работы. Поэтому далее для проверки точности формулы (3.124) ограничимся сравнением с результатами численного решения уравнений динамики для нескольких решеток (см. параграфы 3.3.6.1, 3.3.6.2).

Далее точное решение (3.124) используется для исследования эволюции нескольких конкретных профилей энергии. Выкладки проводятся для произвольных решеток, описываемых уравнением динамики (3.102).

#### 3.3.4.1 Однородное распределение

В настоящем параграфе рассматривается однородное распределение начальной энергии ( $T_0$  не зависит от **x**). В таком случае изменение матрицы T происходит за счет двух физических процессов: перераспределения энергии между кинетической и потенциальной и перераспределения энергии между степенями свободы элементарной ячейки. Данные процессы характерны для начала молекулярно-динамических расчетов [2]. Аналитическое описание данных процессов для нескольких одномерных и двумерных решеток представлено в работах [6, 102, 240, 109, 245, 246]. Обобщение на случай произвольной решетки проведено в работе [115] (см. предыдущую главу). В данных работах использовался подход, изначально предложенный в работе [240] и основанный на анализе ковариаций скоростей частиц. Ниже показано, что аналогичные результаты получаются из формулы (3.124), выведенной на основе точного решения уравнений динамики.

В случае пространственно однородного распределения матрицы T формула (3.124) принимает вид

$$\boldsymbol{T}_{F} = \int_{\mathbf{k}} \boldsymbol{P} \tilde{\boldsymbol{T}}_{F} \boldsymbol{P}^{*\top} d\mathbf{k}, \qquad \boldsymbol{T}_{S} = \int_{\mathbf{k}} \boldsymbol{P} \tilde{\boldsymbol{T}}_{S} \boldsymbol{P}^{*\top} d\mathbf{k},$$
$$\{\tilde{\boldsymbol{T}}_{F}\}_{ij} = \frac{1}{2} \{\boldsymbol{P}^{*\top} \boldsymbol{T}_{0} \boldsymbol{P}\}_{ij} \left[ \cos((\omega_{i} + \omega_{j})t) + (1 - \delta_{ij}) \cos((\omega_{i} - \omega_{j})t) \right]. \quad (3.133)$$
$$\{\tilde{\boldsymbol{T}}_{S}\}_{ij} = \frac{1}{2} \{\boldsymbol{P}^{*\top} \boldsymbol{T}_{0} \boldsymbol{P}\}_{jj} \delta_{ij}.$$

Выражения (3.133) совпадают с точными формулами для матрицы T, полученными в предыдущей главе на основе ковариационного подхода. В частности, формула для  $T_S$  совпадает со стационарным значением матрицы T. Следовательно, в случае однородного поля энергии формула (3.124) становится *точной*.

#### 3.3.4.2 Начальное равное распределение

В настоящем параграфе рассматривается случай, когда начальные кинетические энергии, соответствующие всем степеням свободы элементарной ячейки, равны, т.е.  $T_0 = T_0(\mathbf{x})\mathbf{E}$ , где  $\mathbf{E}$  — единичная матрица. Подстановка данного выражения в формулу (3.124) дает:

$$\boldsymbol{T}_{F} = \int_{\mathbf{k}} \boldsymbol{P} \tilde{\boldsymbol{T}}_{F} \boldsymbol{P}^{*\top} d\mathbf{k}, \qquad \boldsymbol{T}_{S} = \int_{\mathbf{k}} \boldsymbol{P} \tilde{\boldsymbol{T}}_{S} \boldsymbol{P}^{*\top} d\mathbf{k},$$
$$\{\tilde{\boldsymbol{T}}_{F}\}_{ij} = \frac{1}{2} T_{0}(\mathbf{x}) \delta_{ij} \cos(2\omega_{j}t), \qquad \{\tilde{\boldsymbol{T}}_{S}\}_{ij} = \frac{1}{4} \left( T_{0}(\mathbf{x} + \mathbf{v}_{g}^{j}t) + T_{0}(\mathbf{x} - \mathbf{v}_{g}^{j}t) \right) \delta_{ij}.$$
(3.134)

Аналогичное выражение для полной кинетической энергии ячейки (3.134) имеет вид

$$T = T_F + T_S, \qquad T_F = \frac{T_0(\mathbf{x})}{2N} \sum_{j=1}^N \int_{\mathbf{k}} \cos(2\omega_j t) d\mathbf{k},$$
  
$$T_S = \frac{1}{2N} \sum_{j=1}^N \int_{\mathbf{k}} T_0(\mathbf{x} + \mathbf{v}_g^j t) d\mathbf{k}.$$
  
(3.135)

Для скалярных решеток (N = 1) формула (3.135) совпадает с результатом, полученным в предыдущем параграфе на основе другого подхода.

Выражение для  $T_S$  в формуле (3.135) также согласуется с результатами, полученными в работе [150] с использованием функции Вигнера. В работе [150] выводится выражение для полной энергии элементарной ячейки. На больших временах кинетическая и потенциальная энергии практически совпадают, поэтому кинетическая и полная энергии отличаются на постоянный множитель.

Формула (3.134) показывает, что кинетические энергии, соответствующие степеням свободы элементарной ячейки, отличаются, даже если в начальный момент они равны. Далее данный факт иллюстрируется на рис. 3.14, 3.15, 3.16.

## 3.3.4.3 Фундаментальное решение, движение фронта и принцип Гюйгенса

В данном параграфе выводится фундаментальное решение задачи о баллистическом переносе энергии и показывается как оно может быть использовано для определения положения фронта при произвольных начальных условиях.

Рассматривается следующее пространственное распределение начальных кинетических энергий

$$\boldsymbol{T}_0(\mathbf{x}) = A\delta(\mathbf{x})\mathbf{E},\tag{3.136}$$

где  $\delta(\mathbf{x})$  — дельта-функция Дирака; A — константа. Перенос энергии на боль-

ших временах описывается формулой (3.135):

$$T \approx T_S = \frac{A}{4N} \sum_{i=1}^{N} \int_{\mathbf{k}} \left( \delta(\mathbf{x} + \mathbf{v}_g^i t) + \delta(\mathbf{x} - \mathbf{v}_g^i t) \right) d\mathbf{k}.$$
 (3.137)

Ненулевой вклад в интеграл (3.137) дают значения волнового вектора  $\mathbf{k}_{ij}^*$ , при которых аргумент одной из дельта-функций обращается в ноль:

$$\mathbf{v}_g^i(\mathbf{k}_{ij}^*) = \frac{\mathbf{x}}{t} \qquad \text{or} \qquad \mathbf{v}_g^i(\mathbf{k}_{ij}^*) = -\frac{\mathbf{x}}{t}.$$
(3.138)

Здесь  $j = 1, ..., n_i$ , где  $n_i$  — число вещественных корней уравнения (3.138) для ветки *i* дисперсионного соотношения. Тогда вычисление интегралов в формуле (3.137) дает

$$T = \frac{A}{4N(2\pi)^d t^d} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{n_i} \frac{1}{|\det \mathbf{G}_i^d(\mathbf{k}_{ij}^*)|},$$
(3.139)

где суммирование проводится по всем вещественным корням  $\mathbf{k}_{ij}^*, i = 1, ..., N, j = 1, ..., n_i$  уравнений (3.138) (компоненты  $\mathbf{k}_{ij}^*$  принадлежат интервалу [0;  $2\pi$ ]); det — определитель матрицы;  $\mathbf{G}_i^d$  — матрица Якоби в d-мерном случае:

$$\boldsymbol{G}_{i}^{1} = \frac{\partial v_{g}^{i}}{\partial p}, \qquad \boldsymbol{G}_{i}^{2} = \begin{bmatrix} \frac{\partial v_{gx}^{i}}{\partial p_{1}} & \frac{\partial v_{gx}^{i}}{\partial p_{2}} \\ \frac{\partial v_{gy}^{i}}{\partial p_{1}} & \frac{\partial v_{gy}^{i}}{\partial p_{2}} \end{bmatrix}, \qquad \boldsymbol{G}_{i}^{3} = \begin{bmatrix} \frac{\partial v_{gx}^{i}}{\partial p_{1}} & \frac{\partial v_{gx}^{i}}{\partial p_{2}} & \frac{\partial v_{gy}^{i}}{\partial p_{3}} \\ \frac{\partial v_{gy}^{i}}{\partial p_{1}} & \frac{\partial v_{gy}^{i}}{\partial p_{2}} & \frac{\partial v_{gy}^{i}}{\partial p_{3}} \\ \frac{\partial v_{gz}^{i}}{\partial p_{1}} & \frac{\partial v_{gz}^{i}}{\partial p_{2}} & \frac{\partial v_{gz}^{i}}{\partial p_{3}} \end{bmatrix}, \qquad (3.140)$$

где  $v_{gx}^i, v_{gy}^i, v_{gz}^i$  — компоненты вектора групповой скорости  $\mathbf{v}_g^i(\mathbf{k})$  в декартовом базисе.

Величина  $\mathbf{k}_{ij}^*$  в формуле (3.139) является функцией  $\mathbf{x}/t$ , неявно заданной уравнениями (3.138). Следовательно, фундаментальное решение, умноженное на  $t^d$ , — автомодельное и зависит от  $\mathbf{x}/t$ . Данный факт ясно показывает разницу между баллистическим и диффузионным механизмами переноса энергии. В последнем случае фундаментальное решение зависит от  $\mathbf{x}/\sqrt{t}$ .

Для одномерных и двумерных скалярных решеток (N=1) фундаменталь-

ные решения получены в работах [244, 109] (см. предыдущую главу). Данные решения являются частными случаями формулы (3.139).

Фундаментальное решение (3.139) может использоваться для вычисления поля кинетической энергии в кристаллах при точечном подводе энергии с постоянной скоростью. В работах [57, 58] показано, что поле кинетической энергии может быть получено путем интегрирования фундаментального решения задачи без подвода по времени.

Рассмотрим движение фронта, соответствующего фундаментальному решению, т.е. границы области, в которой энергия отлична от нуля. В случае, когда групповая скорость ограничена, из формул (3.138), (3.139) следует, что фронт, соответствующий фундаментальному решению, — сфера в пространстве размерности *d*:

$$|\mathbf{x}| = t \max_{\mathbf{k},j} |\mathbf{v}_g^j(\mathbf{k})|.$$
(3.141)

Иными словами, во всех решетках фронт, соответствующий фундаментальному решению, распространяется во всех направлениях с одинаковой скоростью, равной максимальной групповой скорости (см., например, рис. 3.18).

Формула (3.141) позволяет использовать принцип Гюйгенса для определения положения фронта в случае произвольного распределения начальной энергии. Фронт в момент времени t представляет собой поверхность, касательную к множеству сфер с центрами в точках начального фронта и радиусами, равными  $t \max_{\mathbf{k},j} |\mathbf{v}_g^j(\mathbf{k})|$ .

## 3.3.4.4 Ступенчатое начальное распределение энергии

Рассмотрим контакт двух полупространств, имеющих начальные температуры  $T_b$  и  $T_b + \Delta T$ . В случае, если кинетическая энергия отождествляется с энергией теплового движения частиц, данная задача тесно связана с классическим определением температуры. По определению кинетические температуры двух тел, находящихся в тепловом равновесии, равны. Рассмотренная ниже задача показывает, как происходит переход к тепловому равновесию.

Рассматривается следующее начальное распределение температуры в направлении, заданном **e**:

$$\boldsymbol{T}_0 = (T_b + \Delta T H(x)) \, \mathbf{E}, \qquad x = \mathbf{x} \cdot \mathbf{e}, \tag{3.142}$$

где *H* — функция Хевисайда. Подстановка формулы (3.142) в формулу (3.134) дает

$$\{\tilde{\boldsymbol{T}}_{F}\}_{ij} = \frac{1}{2} \left(T_{b} + \Delta T H(x)\right) \delta_{ij} \cos(2\omega_{j}t),$$

$$\{\tilde{\boldsymbol{T}}_{S}\}_{ij} = \frac{T_{b}}{2} \delta_{ij} + \frac{\Delta T}{4} \left(H\left(x + \mathbf{v}_{g}^{j} \cdot \mathbf{e}t\right) + H\left(x - \mathbf{v}_{g}^{j} \cdot \mathbf{e}t\right)\right) \delta_{ij}.$$
(3.143)

Вычисляя кинетическую температуру с использованием формул (3.134), (3.143) и свойств функции Хевисайда H(ax) = H(x), a > 0, получим

$$T = T_F + T_S, \qquad T_F = \frac{1}{2N} \left( T_b + \Delta T H(x) \right) \sum_{j=1}^N \int_{\mathbf{k}} \cos(2\omega_j t) d\mathbf{k},$$
  
$$T_S \left( \frac{x}{t} \right) = \frac{T_b}{2} + \frac{\Delta T}{4N} \sum_{j=1}^N \int_{\mathbf{k}} \left( H \left( \frac{x}{t} + \mathbf{v}_g^j \cdot \mathbf{e} \right) + H \left( \frac{x}{t} - \mathbf{v}_g^j \cdot \mathbf{e} \right) \right) d\mathbf{k}.$$
  
(3.144)

Формула (3.144) показывает, что медленная часть матрицы  $T_S$  — автомодельная и зависит от x/t. Данный факт используется при сравнении с результатами численного решения уравнений движения в параграфах 3.3.6.1, 3.3.6.2.

#### 3.3.4.5 Синусоидальное распределение энергии

В данном параграфе рассматривается синусоидальное поле кинетической энергии. Такие начальные условия часто используются при моделировании переноса энергии в кристаллах [61, 62], т.к. позволяют легко отличить баллистический режим переноса энергии от диффузионного. Кроме того, данная задача тесно связана с экспериментальным методом transient thermal grating [87, 174]. В рамках данного метода синусоидальное поле кинетической температуры создается за счет интерференции двух лазерных импульсов. Амплитуда температурного профиля затухает со временем за счет теплопроводности. Измерение амплитуды дает информацию о тепловых свойствах материала. Ниже приводится аналитическое решение данной задачи в случае баллистического распространения тепловой энергии в бесконечном кристалле.

Начальное распределение энергии в направлении, заданном вектором **e**, имеет вид:

$$T_0(\mathbf{x}) = \left(T_b + \Delta T \sin \frac{2\pi x}{L}\right) \mathbf{E}, \qquad x = \mathbf{x} \cdot \mathbf{e},$$
 (3.145)

где  $T_b$ ,  $\Delta T$  — константы;  $\Delta T < T_b$ ; L — длина ячейки периодичности в направлении теплового возмущения. Начальные кинетические энергии, соответствующие всем степеням свободы, в каждой элементарной ячейке равны.

Матрица **T** в момент времени t вычисляется по формуле (3.134). Подстановка начального распределения энергии (3.145) в формулу (3.134) после несложных преобразования дает:

$$\boldsymbol{T}_{F} = \frac{1}{2} \left( T_{b} + \Delta T \sin \frac{2\pi x}{L} \right) \boldsymbol{F}(t), \qquad \boldsymbol{T}_{S} = \frac{T_{b}}{2} \mathbf{E} + \frac{\Delta T}{2} \boldsymbol{S}(t) \sin \frac{2\pi x}{L},$$
$$\boldsymbol{F} = \int_{\mathbf{k}} \boldsymbol{P} \tilde{\boldsymbol{F}} \boldsymbol{P}^{*\top} d\mathbf{k}, \qquad \boldsymbol{S} = \int_{\mathbf{k}} \boldsymbol{P} \tilde{\boldsymbol{S}} \boldsymbol{P}^{*\top} d\mathbf{k}, \qquad (3.146)$$
$$\tilde{F}_{ij} = \cos(2\omega_{j} t) \delta_{ij}, \quad \tilde{S}_{ij} = \cos \frac{2\pi v_{g}^{j} t}{L} \delta_{ij}.$$

Здесь  $v_g^j = \mathbf{v}_g^j \cdot \mathbf{e}$ . Вычисляя след в формуле (3.146), получим простое выражение для кинетической энергии ячейки:

$$T = T_F + T_S, \qquad T_F = \frac{1}{2N} \left( T_b + \Delta T \sin \frac{2\pi x}{L} \right) \sum_{j=1}^N \int_{\mathbf{k}} \cos(2\omega_j t) d\mathbf{k},$$
  
$$T_S = \frac{T_b}{N} + \frac{\Delta T}{2N} \sin \frac{2\pi x}{L} \sum_{j=1}^N \int_{\mathbf{k}} \cos \frac{2\pi v_g^j t}{L} d\mathbf{k}.$$
  
(3.147)

Формула (3.147) показывает, что пространственное распределение кинетиче-

ской энергии остается синусоидальным. Следовательно, достаточно рассматривать поведение амплитуды синуса во времени. В натурных экспериментах амплитуда может быть измерена с помощью метода transient thermal grating [87, 174]. В одномерном случае амплитуда вычисляется по формуле

$$\boldsymbol{A} = \frac{2}{L} \int_0^L \boldsymbol{T}(x,t) \sin \frac{2\pi x}{L} \mathrm{d}x, \qquad A = \frac{1}{N} \mathrm{tr} \boldsymbol{A} = \frac{2}{L} \int_0^L \boldsymbol{T}(x,t) \sin \frac{2\pi x}{L} \mathrm{d}x,$$
(3.148)

В двумерном и трехмерном случаях результаты дополнительно осредняются в направлениях, перпендикулярных *x*. Подстановка выражения для кинетической энергии (3.146) в формулу (3.148) дает

$$\boldsymbol{A} = \Delta T \left( \boldsymbol{F}(t) + \boldsymbol{S}(t) \right), \qquad \boldsymbol{A} = \frac{\Delta T}{2N} \sum_{j=1}^{N} \int_{\mathbf{k}} \left( \cos(2\omega_j t) + \cos\frac{2\pi v_g^j t}{L} \right) d\mathbf{k}.$$
(3.149)

Формула (3.149) показывает, что эволюция амплитуды *А* зависит от направления начального возмущения **е**. Следовательно, перенос энергии в двумерном и трехмерном случаях анизотропен (см. например, рис. 3.21).

Из формулы (3.146) видно, что величины  $T_F$  и  $T_S$  имеют разные характерные времена, пропорциональные  $1/\omega_j$  и  $L/v_g^j$  соответственно. Характерное время быстрых процессов соизмеримо с периодом колебаний атомов. Характерное время медленного процесса определяется временем, необходимым для того, чтобы волна прошла L. Следовательно, характерные времена быстрых и медленных процессов заметно отличаются.

Из формулы (3.149) и метода стационарной фазы [47] следует, что амплитуда энергии A затухает на больших временах как  $1/t^{\frac{d}{2}}$ . Отметим, что решение аналогичной задачи в с использованием уравнений Фурье и Максвела-Катанео [27, 202] дают экспоненциальное затухание.

Таким образом, затухание амплитуды синусоидального поля кинетической энергии в чисто баллистическом режиме описывается формулой (3.149). По-
лученные результаты могут послужить для интерпретации экспериментальных результатов, получаемых методом transient thermal grating [87, 174]. В частности, в работе [80] показано, что затухание температуры в поликристаллическом графите при температуре 100K происходит немонотонно. Аналогичный эффект получается из формулы (3.149) (см. например рис. 3.21). Формула (3.149) также показывает, что на больших временах амплитуда A зависит от времени t и периода L следующим образом: A(t, L) = f(t/L). Следовательно, результаты для разных периодов  $L_1$ ,  $L_2$  связаны соотношением  $A(t, L_1) = A(\tilde{t}, L_2)$ ,  $\tilde{t} = tL_2/L_1$ . Данный факт может использоваться при интерпретации экспериментальных данных и молекулярно-динамическом моделировании.

# 3.3.5 О связи с кинетической теорией описания переноса тепловой энергии

#### О квази-частицах, переносящих тепловую энергию

В настоящем параграфе обсуждается связь полученных выше результатов с кинетической теорией Пайерлса-Больцмана [165]. В рамках кинетической теории тепло переносится квази-частицами, заполняющими тело. Движение частиц (эволюция их плотности распределения) описывается уравнением Больцмана. В линейных кристаллах квази-частицы движутся свободно, а в нелинейных — взаимодействуют. В таком случае задача о переносе тепла напоминает задачу о течении газа. Кинетическая теория позволяет решать сложные практические задачи, не поддающиеся аналитическому решению (см. например, обзор [19]). Однако физический смысл квази-частиц часто остается за кадром.

В литературе квази-частицы часто ассоциируют с фононами, т.е. квантами энергии плоских волн в решетке. Следовательно, фононы не локализованы в пространстве и не могут претендовать на роль квази-частиц, используемых в кинетической теории. Данный факт был наглядно продемонстрирован в работе [189], где было показано, что плотность распределения квази-частиц тесно связана с функцией Вигнера. Уравнение, описывающее эволюцию функции Вигнера в линейных кристаллах, получено в работе [150]. Обобщение на случай слабой нелинейности приведено в работах [189], [140]. Далее для определения физического смысла квази-частиц будет использоваться другой подход. Вместо того чтобы вводить новый математический объект (функцию Вигнера) и выводить для него уравнения динамики, мы будем выводить все результаты непосредственно из точного выражения для кинетической температуры.

Различие между квази-частицами, используемыми при кинетическом описании, и фононами было впервые отмечено в монографии Френкеля [51], где и было введено понятие фонона<sup>1</sup>. В монографии Френкеля было предложено в качестве квази-частиц использовать волновые пакеты, т.е. совокупности волн с близкими волновыми числами. Волновые пакеты, как и квази-частицы локализованы в пространстве и двигаются с групповыми скоростями. Однако переход от точного выражения для температуры к приближенному решению в терминах волновых пакетов в литературе представлен не был. В настоящем параграфе данный переход проводится на примере одномерной цепочки. Приведенные результаты опубликованы в работе [120].

#### Уравнение движения и начальные условия

Рассмотрим одномерный гармонический кристалл, состоящий из N одинаковых частиц, соединенных пружинками. Уравнения движения кристалла можно записать в виде:

$$m\dot{v}_i = \sum_{j=-n}^n C_j(u_{i+j} - u_i) - C_0 u_i, \qquad v_i = \dot{u}_i, \qquad (3.150)$$

где  $C_j = C_{-j}$  — жесткость связи с соседом номер j,  $C_0$  — жесткость упругого основания, 2n — число соседей. Уравнения (3.150) решаются при периодических

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Иногда утверждается, что поняте фонона было введено И.Е. Тамом. Однако в работах Тамма нам удалось найти только понятие упругого кванта ("elastischen quanten" [193]), в то время как в монографии [51] использовался именно термин фонон.

граничных условиях  $u_i = u_{i+N}$ .

В начальный момент времени частицы имеют случайные скорости и нулевые перемещения:

$$u_{i0} = 0, \qquad v_{i0} = \alpha_i \sqrt{\frac{k_{\rm B} T_i^0}{m}}, \qquad \left\langle \alpha_i \right\rangle = 0, \qquad \left\langle \alpha_i \alpha_j \right\rangle = \delta_{ij}, \qquad (3.151)$$

где  $\alpha_i$  — некоррелированные случайные числа с нулевым математическим ожиданием и единичной дисперсией,  $T_i^0$  — начальная температура частицы  $i, k_B$  постоянная Больцмана. Отметим, что при таких начальных условиях тепловые потоки в начальный момент времени отсутствуют.

Далее рассматривается бесконечное множество реализаций системы (3.150) со случайными начальными условиями (3.151). Основной исследуемой величиной является кинетическая температура цепочки, определяемая формулой:

$$k_B T_i = m \left\langle v_i^2 \right\rangle, \tag{3.152}$$

где  $\left< \dots \right>$  — математическое ожидание.

#### Точное выражение для температуры

В настоящем параграфе начальная задача (3.150), (3.151) решается с использования дискретного преобразования Фурье, определяемого формулами:

$$\hat{u}_p = \sum_{i=0}^{N-1} u_i e^{-i\frac{2\pi i p}{N}}, \qquad u_i = \frac{1}{N} \sum_{p=0}^{N-1} \hat{u}_p e^{i\frac{2\pi i p}{N}}, \qquad (3.153)$$

где  $\hat{u}_p - \Phi$ урье-образ. Применяя дискретное преобразование  $\Phi$ урье в уравнении движения (3.150), получим:

$$\dot{\hat{v}}_p = -\omega_p^2 \hat{u}_p, \qquad \omega_p^2 = 4 \sum_{j=1}^n \frac{C_j}{m} \sin^2 \frac{\pi p j}{N} + \frac{C_0}{m}.$$
 (3.154)

Решая данное уравнение с начальными условиями, соответствующими (3.151), и применяя обратное преобразование Фурье, получим следующую формулу для скоростей:

$$v_i = \frac{1}{N} \sum_{j,p=0}^{N-1} v_{j0} \cos(\omega_p t) e^{i\frac{2\pi(i-j)p}{N}}.$$
(3.155)

Подстановка точного выражения для скоростей в формулу для температуры дает:

$$k_{\rm B}T_i = \frac{m}{N^2} \sum_{j,p,k,s=0}^{N-1} \left\langle v_{j0} v_{k0} \right\rangle \cos(\omega_p t) \cos(\omega_s t) e^{i\frac{2\pi(i-j)p}{N}} e^{-i\frac{2\pi(i-k)s}{N}}.$$
 (3.156)

Здесь в силу вещественности скоростей вычислена величина  $\langle v_i v_i^* \rangle = \langle v_i^2 \rangle$ , \* обозначает операцию комплексного сопряжения. Далее воспользуемся тождеством  $m \langle v_{j0} v_{k0} \rangle = k_B T_j^0 \delta_{jk}$ , следующим из начальных условий (3.151). Тогда формула (3.156) принимает вид

$$T_{i} = \frac{1}{N^{2}} \sum_{j,p,s=0}^{N-1} T_{j}^{0} \cos(\omega_{p} t) \cos(\omega_{s} t) \cos\left(\frac{2\pi}{N} (i-j)(p-s)\right).$$
(3.157)

Формула (3.157) дает точное выражение для температуры в периодическом кристалле.

Перейдем к пределу, когда число частиц в ячейке периодичности стремится к бесконечности<sup>2</sup>. Тогда формула (3.157) принимает вид:

$$T_{i} = \frac{1}{4\pi^{2}} \sum_{j=-\infty}^{+\infty} T_{j}^{0} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \cos(\omega(k_{1})t) \cos(\omega(k_{2})t) \cos((i-j)\Delta k) dk_{1} dk_{2},$$
  

$$\omega^{2}(k) = 4 \sum_{j=1}^{n} \frac{C_{j}}{m} \sin^{2} \frac{jk}{2} + \frac{C_{0}}{m}, \qquad \Delta k = k_{1} - k_{2},$$
(3.158)

Таким образом, точное решение задачи о переносе тепла для бесконечной

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Здесь используется тот факт, что в силу периодичности выражения под суммой в формуле (3.157) суммирование можно вести по интервалу, симметричному относительно нуля. В пределе данный интервал превращается в множество целых чисел.

одномерной цепочке дано формулой (3.158). Большинство последующих результатов выводится из формулы (3.158). Формула показывает, что вклад частицы jв температуру частицы i определяется двойным интегралом. Подынтегральное выражение дает вклад волн с волновыми числами  $k_1$ ,  $k_2$ . С учетом того, что вклад волн может быть отрицательным, они могут частично компенсировать друг друга. Далее будет показано, что в континуальном пределе основной вклад дается волнами с близкими волновыми векторами  $k_1 \approx k_2$ .

### Основные предположения, используемые для перехода к континуальному пределу

В настоящем пункте описываются основные идеи, используемые для перехода от точного выражения для температуры (3.162) к континуальному пределу.

Основное предположение заключается в том, что начальное распределение температуры  $T_i^0$  считается медленно меняющимся по пространству. Для строгой формулировки данного предположения разделим цепочку на группы, содержащие по  $2\Delta N$  частиц (см. рис.3.12). Среднюю частицу в группе *s* обо-



Рис. 3.12: Начальное распределение температуры в цепочке.

значим  $j_s$   $(j_{s+1} = j_s + 2\Delta N)$ . Тогда предположение о медленном изменении начальной температуры можно записать с помощью соотношений:

$$T_i^0 \approx T_{j_s}^0, \quad i \in [j_s - \Delta N + 1; j_s + \Delta N],$$
 (3.159)

$$a\Delta N \ll L,$$
 (3.160)

$$\Delta N \gg 1. \tag{3.161}$$

Здесь L — характерный макроскопический масштаб, на котором решается задача о переносе тепла. Иными словами, считается, что функция  $T_i^0$  медленно меняется на масштабах длины порядка  $a\Delta N$ . При этом величина  $a\Delta N$  мала по сравнению с L, а число частиц  $\Delta N$  — большое.

## Связь фундаментальных решений дискретной и континуальной задачи

В настоящем параграфе устанавливается связь между фундаментальными решениями дискретной и континуальной задач о переносе тепла. Как было показано ранее тепловые процессы имеют несколько характерных временных масштабов. На малых временах порядка нескольких периодов атомных колебаний температура колеблется с высокой частотой. Колебания вызваны уравниванием кинетической и потенциальной энергий. На больших временах изменения температуры вызваны переносом тепла. Далее будем использовать следующее разделение на быстрые и медленные процессы:

$$T_{i} = T_{i}^{F} + T_{i}^{S}, \qquad T_{i}^{F} = \sum_{j=-\infty}^{\infty} T_{j}^{0} F_{i-j}, \qquad T_{i}^{S} = \sum_{j=-\infty}^{\infty} T_{j}^{0} S_{i-j},$$

$$F_{i-j} = \frac{1}{8\pi^{2}} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \cos\left((\omega(k_{1}) + \omega(k_{2}))t\right) \cos\left(\Delta k(i-j)\right) dk_{1} dk_{2}, \qquad (3.162)$$

$$S_{i-j} = \frac{1}{8\pi^{2}} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \cos\left((\omega(k_{1}) - \omega(k_{2}))t\right) \cos\left(\Delta k(i-j)\right) dk_{1} dk_{2}.$$

Здесь  $T_i^F$  описывает колебания температуры, связанные с уравниванием энергий (быстрый процесс), а  $T_i^S$  — перенос тепла (медленный процесс). Далее будет подробно рассмотрено поведение ( $T_i^S$ ). Отметим, что в начальный момент времени  $T_i^S = T_i^F = \frac{1}{2}T_i^0$ .

Воспользуемся медленным изменением функции  $T_i^0$  (формула (3.159)). Бу-

дем считать, что изменением функции  $T_i^0$  в пределах каждого интервала длиной  $2\Delta N$  можно пренебречь. Тогда формула (3.162) принимает вид:

$$T_i^S = \sum_{s=-\infty}^{+\infty} \sum_{j=j_s-\Delta N+1}^{j_s+\Delta N} T_j^0 S_{i-j} \approx \sum_{s=-\infty}^{+\infty} T_{j_s}^0 g(i-j_s,\Delta N) 2a\Delta N,$$
  
$$g(i-j_s,\Delta N) = \frac{1}{2a\Delta N} \sum_{l=-\Delta N+1}^{\Delta N} S_{i-j_s-l}.$$
(3.163)

Функция  $g(i - j_s, \Delta N)$  определяет вклад окрестности точки  $j_s$  в температуру точки *i*. Далее удобно воспользоваться еще одним приближением и переписать формулу (3.163) в виде

$$T_i^S \approx \sum_{s=-\infty}^{+\infty} T_{i-j_s}^0 g(j_s, \Delta N) 2a\Delta N.$$
(3.164)

Отметим, что формулы (3.163) и (3.164) совпадают только в континуальном пределе (см. формулу (3.166)).

Воспользуемся тем, что  $a\Delta N$  много меньше характерного макроскопического масштаба *L*. Введем новые функции  $T_0(x)$  и  $g_c(x)$  вещественной переменной xтакие, что

$$T_S(ai) = T_i^S, \qquad T_0(ai) = T_i^0, \qquad g_c(ai) = \lim_{\substack{a\Delta N \\ L} \to 0} g(i, \Delta N).$$
 (3.165)

При этом, вообще говоря, континуальное поле температуры определено только в точках, где есть частицы. Определение в остальных точках не требуется в силу предположения о медленном изменении температуры.

При стремлении  $a\Delta N/L$  к нулю сумма в формуле (3.163) стремится к интегралу:

$$T_S(x) = \int_{-\infty}^{\infty} T_0(y) g_c(x-y) dy = \int_{-\infty}^{\infty} T_0(x-y) g_c(y) dy.$$
(3.166)

Функция *g<sub>c</sub>* представляет собой фундаментальное решение задачи о баллистическом распространении тепла в континуальной постановке.

Таким образом, формулы (3.163), (3.165) показывают, что фундаментальное решение континуальной задачи есть среднее от фундаментального решения дискретной задачи.

#### Континуализация фундаментального решения

В настоящем пункте выводится выражение для континуального фундаментального решения *g<sub>c</sub>*.

В соответствии с формулой (3.165) континуальное фундаментальное решение находится как предел функции *g*, определенной формулой (3.163). Перепишем функцию *g* в виде:

$$g(j,\Delta N) = \frac{1}{8\pi^2 a} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \cos\left((\omega(k_1) - \omega(k_2))t\right) \varphi(j,\Delta k,\Delta N) dk_1 dk_2,$$
  

$$\varphi(j,\Delta k,\Delta N) = \frac{1}{2\Delta N} \sum_{l=-\Delta N+1}^{\Delta N} \cos\left(\Delta k(j-l)\right).$$
(3.167)

Рассмотрим более подробно функцию  $\varphi$ . Проведем следующие преобразования:

$$\varphi = \frac{\cos(j\Delta k)}{2\Delta N} \sum_{l=-\Delta N+1}^{\Delta N} \cos\left(\Delta kl\right) + \frac{\sin(j\Delta k)}{2\Delta N} \sum_{l=-\Delta N+1}^{\Delta N} \sin\left(\Delta kl\right).$$
(3.168)

Подстановка тождеств

$$\sum_{l=-\Delta N+1}^{\Delta N} \cos(\Delta kl) = \cot \frac{\Delta k}{2} \sin \left(\Delta N \Delta k\right), \qquad \sum_{l=-\Delta N+1}^{\Delta N} \sin(\Delta kl) = \sin \left(\Delta N \Delta k\right)$$
(3.169)

в формулу (3.168) дает искомое выражение для  $\varphi$ :

$$\varphi = \frac{\Delta k}{2} \operatorname{sinc}(\Delta N \Delta k) \left[ \cot \frac{\Delta k}{2} \cos(j\Delta k) + \sin(j\Delta k) \right], \qquad (3.170)$$

где sinc  $x = \sin(x)/x$ , cot  $x = \cos x / \sin x$ .

Дальнейшие упрощения основаны на свойствах функции  $\varphi$  при больших  $\Delta N$ . Данная функция равна единице при  $\Delta k = 0$  и  $\Delta k = \pm 2\pi$ , а в остальных точках стремится к нулю при увеличении  $\Delta N$ . При этом точки  $\Delta k = 0$  – диагональ квадратной области интегрирования, а точки  $\Delta k = \pm 2\pi$  – вершины. Следовательно, при больших  $\Delta N$  основной вклад в интеграл (3.167) дается точками  $\Delta k = 0$  ( $k_1 \approx k_2$ ). Тогда под интегралом (3.167) можно провести разложение в ряд по  $\Delta k$ :

$$\omega(k_1) - \omega(k_2) \approx \Delta k \omega'(k_1), \qquad \omega' = \frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}, \qquad \varphi \approx \operatorname{sinc}(\Delta N \Delta k) \cos(j\Delta k).$$
(3.171)

где  $\omega' = d\omega/dk$ . С учетом формул (3.171) и замены переменных  $q_1 = k_1, q_2 = k_1 - k_2$  формула (3.167) принимает вид:

$$g \approx \frac{1}{4\pi} \int_0^{\pi} \left[ \psi \left( j + \omega'(q_1)t, \Delta N \right) + \psi \left( j - \omega'(q_1)t, \Delta N \right) \right] \mathrm{d}q_1, \tag{3.172}$$

$$\psi = \frac{1}{2\pi a} \int_{q_1 - \pi}^{q_1 + \pi} \cos\left(q_2 \left(j + \omega'(q_1)t\right)\right) \operatorname{sinc}\left(q_2 \Delta N\right) \mathrm{d}q_2.$$
(3.173)

Функция  $\psi$  — волновой пакет, распространяющийся с групповой скоростью  $c_g = a\omega'$ . Таким образом, волновые пакеты появляются в результате осреднения дискретного фундаментального решения по интервалу  $2\Delta N$ .

Получим приближенное выражение для  $\psi$  в случа<br/>е $\Delta N\gg 1,~a\Delta N\ll L.$  Проведем следующие преобразования<sup>3</sup>

$$\psi = \frac{1}{2\pi a} \int_{q_1 - \pi}^{q_1 + \pi} \cos\left(q_2(j + \omega' t)\right) \operatorname{sinc}\left(\Delta N q_2\right) \mathrm{d}q_2 =$$

$$= \frac{1}{2\pi a \Delta N} \int_{(q_1 - \pi)\Delta N}^{(q_1 + \pi)\Delta N} \cos\frac{q_2(j + \omega' t)}{\Delta N} \operatorname{sinc} q_2 \mathrm{d}q_2 \approx \qquad (3.174)$$

$$\approx \frac{1}{2\pi a \Delta N} \int_{-\infty}^{+\infty} \cos\frac{q_2(j + \omega' t)}{\Delta N} \operatorname{sinc} q_2 \mathrm{d}q_2.$$

 $<sup>^{3}</sup>$ Для конечных  $\Delta N$  интеграл в формуле (3.173) может быть выражен через специальные функции.

Здесь  $q_1 \in [0; \pi], \, \omega' = \omega'(q_1).$  Вычисление интеграла в правой части формулы (3.174) дает

$$\psi \approx \begin{cases} \frac{1}{2a\Delta N}, & a|j + \omega' t| < a\Delta N, \\ 0, & a|j + \omega' t| > a\Delta N. \end{cases}$$
(3.175)

Функция  $\psi$  для разных значений  $\Delta N$  и  $q_1$  показана на рис. 3.13. Видно, что



Рис. 3.13: Волновой пакет  $\psi$  для  $\Delta N = 1, 2, 10, 50, q_1 = 0$  (слева) и  $q_1 = 0.9\pi$  (справа). С учетом четности функции  $\psi$  показаны только значения для положительных значений аргумента.

при  $\Delta N$  стремящемся к бесконечности функция  $\psi$  принимает форму прямоугольного импульса (3.175). Рисунок 3.13 показывает, что скорость сходимости больше для малых  $q_1$ .

Величина  $a\Delta N$  мала по сравнению с макроскопическим масштабом L. Следовательно, для  $a\Delta N \ll L$  функция  $\psi$  может быть приближенно заменена на дельта-функцию Дирака:

$$\psi(j + \omega' t) \approx \delta(a(j + \omega' t)). \tag{3.176}$$

Тогда, переходя к пределу  $a\Delta N/L \to 0$  в формуле (3.172), получим контину-

альное фундаментальное решение:

$$g_c(x) = \frac{1}{4\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \delta(x + c_g(q)t) \mathrm{d}q, \qquad c_g = a\omega'.$$
 (3.177)

Формулы (3.172), (3.177) показывают, что континуальное фундаментальное решение представляется в виде суперпозиции волновых пакетов  $\psi$ . В континуальном пределе волновые пакеты можно заменить на дельта-функции, имеющие определенные положения в пространстве и движущиеся с групповыми скоростями, зависящими от волнового вектора. Следовательно, волновые пакеты можно ассоциировать с квази-частицами, используемыми при кинетическом описании.

Отметим, что положение волнового пакета определено с точностью до величины порядка  $a\Delta N$ , а ширина волнового пакета в пространстве Фурье (разброс волновых чисел волн, входящих в пакет) наоборот — обратно пропорциональна  $\Delta N$ .

#### Время жизни квазичастиц

Волновые пакеты состоят из волн с близкими, но не равными волновыми числами. Обозначим максимальную разницу между волновыми числами  $\max(\Delta k)$ . В силу дисперсии скорости волн, входящих в пакет, различны и, следовательно, ширина пакета растет со временем. Введем "время жизни" пакета (квазичастицы)  $t_*$ , определяемое как время, за которое пакет увеличивает свою ширину на величину порядка  $a\Delta N$ . Для оценки разности скоростей волн в пакете, рассмотрим первую из формул (3.171). В данной формуле отброшены слагаемые порядка  $\max(\omega'')\max(\Delta k)^2 t$ . Следовательно разница в скоростях волн имеет порядок  $a\max(\omega'')\max(\Delta k)$ . Из формулы (3.170) видно, что  $\max(\Delta k) \sim \Delta N^{-1}$ . Тогда получаем следующую оценку для времени жизни квази-частицы

$$t_* \sim \frac{\Delta N}{\max(\omega'')\max(\Delta k)} \sim \frac{\Delta N^2}{\max(\omega'')}.$$
 (3.178)

Для среды без дисперсии время жизни бесконечно. В противном случае оно пропорционально  $\Delta N^2$ . Следовательно, время жизни зависит от скорости изменения начального температурного поля, определяющей величину  $\Delta N$ .

#### Общее решение задачи о переносе тепловой энергии

Общее решение задачи о переносе тепла при произвольном  $T_0(x)$  строится с использованием фундаментального решения (3.177). Подстановка формулы (3.177) в интеграл (3.166) дает

$$T_S(x) = \frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} T_0(x-y) \int_{-\pi}^{\pi} \delta(y+c_g(q)t) \mathrm{d}q \mathrm{d}y = \frac{1}{4\pi} \int_{-\pi}^{\pi} T_0(x+c_g(q)t) \mathrm{d}q.$$
(3.179)

Таким образом, использованием приближений (3.159), (3.160), (3.161) в точном решении (3.162) позволяет получить приближенное континуальное выражение (3.179) для температуры. Строго говоря, формула (3.179) применима только для медленно меняющихся начальных условий, удовлетворяющих условиям (3.159), (3.160), (3.161). Однако моделирование показывает, что оно имеет приемлемую точность и для разрывных начальных условий, заданных, например, функцией Хевисайда (см. работы [109], [103], [244]).

#### 3.3.5.1 Заключительные замечания о квази-частицах

Приведенные выше выкладки показывают, что переход от точного выражения для температуры к континуальному пределу может быть произведен с использованием предположений (3.159), (3.160), (3.161). Основное предположение состоит в медленном изменении температуры в пространстве. С использованием данного предположения вводится масштаб  $a\Delta N$ , большой в сравнении с шагом решетки *a* и малый в сравнении с макроскопическим масштабом. Изменение температуры на масштабе  $a\Delta N$  считается малым. В таком случае макроскопическое фундаментальное решение представляется в виде среднего от дискретного фундаментального решения. Осреднение приводит к появлению волновых пакетов, т.е. групп волн с близкими волновыми числами. Волновые пакеты локализованы в пространстве и движутся с групповыми скоростями. Данные факты позволяют интерпретировать волновые пакеты как квази-частицы.

Показано, что квази-частицы имеют два важных свойства. Во-первых, положение квази-частицы определено с точностью до величины порядка  $a\Delta N$ , равной ширине пакета. Наоборот, характерная ширина волнового пакета в пространстве Фурье обратно пропорциональна  $\Delta N$ . Следовательно, локализации в физическом пространстве и Фурье-пространстве конкурируют друг с другом. Данный факт напоминает принцип неопределенности, используемый в квантовой механике. Во-вторых, дисперсия приводит к увеличению ширины волнового пакета со временем. Следовательно, кинетическое описание переноса тепла, основанное на использовании квази-частиц, остается верным в течение некоторого конечного времени порядка времени жизни квази-частиц. Показано, что время жизни пропорционально  $\Delta N^2$  (см. формулу (3.178)). По-видимому, наибольшие сложности будут при решении задач с локализованным начальным распределением температуры  $T_0(x)$ . Однако данный вопрос требует дальнейшего исследования.

#### 3.3.6 Примеры

#### 3.3.6.1 Пример. Двухатомная цепочка

В настоящем параграфе рассматривается баллистический перенос энергии в простейшей одномерной двухатомной цепочке. Показано, что формула (3.124) с высокой точностью описывает эволюцию поля кинетической энергии во времени. Также показано, что в процессе переноса энергии, соответствующие разным степеням свободы элементарной ячейки, существенно отличаются, даже если изначально они заданы равными.

#### Уравнения движения и начальные условия

Рассматривается двухатомная цепочка с чередующимися массами  $m_1$ ,  $m_2$  и жесткостями  $c_1$ ,  $c_2$  (см. рис. 2.5). Цепочка состоит и двух подрешеток, содержащих частицы массы  $m_1$  и  $m_2$ .

Запишем уравнения движения в матричном виде (3.102). Элементарные ячейки нумеруются индексом *j*. Радиус-вектор элементарной ячейки *j* задается формулой

$$\mathbf{x}_j = x_j \mathbf{e}, \qquad x_j = a\left(j - \frac{n_c}{2}\right),$$
(3.180)

где *а* — расстояние между соседними элементарными ячейками; **е** — единичный вектор, направленный вдоль цепочки; *n<sub>c</sub>* — полное число элементарных ячеек в ячейке периодичности. Каждая частица имеет одну степень свободы. Перемещения частиц из ячейки *j* имеют вид

$$\boldsymbol{u}_j = \boldsymbol{u}(\mathbf{x}_j) = \begin{bmatrix} u_{1j} & u_{2j} \end{bmatrix}^\top,$$
 (3.181)

где  $u_{1j}, u_{2j}$  — перемещения частиц с массами  $m_1$  и  $m_2$  соответственно. Тогда уравнение движения имеет вид

$$\boldsymbol{M}\ddot{\boldsymbol{u}}_{j} = \boldsymbol{C}_{1}\boldsymbol{u}_{j+1} + \boldsymbol{C}_{0}\boldsymbol{u}_{j} + \boldsymbol{C}_{-1}\boldsymbol{u}_{j-1},$$
$$\boldsymbol{M} = \begin{bmatrix} m_{1} & 0 \\ 0 & m_{2} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{C}_{0} = \begin{bmatrix} -c_{1} - c_{2} & c_{1} \\ c_{1} & -c_{1} - c_{2} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{C}_{1} = \boldsymbol{C}_{-1}^{\top} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ c_{2} & 0 \\ (3.182) \end{bmatrix}.$$

В начальный момент времени частицы имеют случайные скорости и нулевые перемещения. В настоящем параграфе начальные энергии подрешеток равны ( $T_{11}^0 = T_{22}^0 = T_0$ ), т.е.  $T_0(x_j) = T_0(x_j)\mathbf{E}$ . Соответствующие начальные условия для частиц имеют вид:

$$u_{1j} = u_{2j} = 0, \quad \dot{u}_{1j} = \beta_j \sqrt{\frac{2}{m_1} T_0(x_j)}, \quad \dot{u}_{2j} = \gamma_j \sqrt{\frac{2}{m_2} T_0(x_j)},$$
 (3.183)

где  $\beta_j$ ,  $\gamma_j$  — некоррелированные случайные числа с нулевым математическим ожиданием и единичной дисперсией, т.е.  $\left<\beta_j\right> = \left<\gamma_j\right> = 0$ ,  $\left<\beta_j^2\right> = \left<\gamma_j^2\right> = 1$ ,  $\left<\beta_i\gamma_j\right> = 0$  для всех i, j.

#### Дисперсионное соотношение и групповая скорость

В настоящем параграфе вычисляются дисперсионное соотношение, матрица  $\boldsymbol{P}$  и групповые скорости, входящие в формулу (3.124) для матрицы  $\boldsymbol{T}$ .

Динамическая матрица  $\boldsymbol{\Omega}$  вычисляется по формуле (3.108). Подставляя выражения (3.182) для матриц  $\boldsymbol{M}, \boldsymbol{C}_{\alpha}, \alpha = 0, \pm 1$  в формулу (3.108), получим

$$\boldsymbol{\Omega} = \begin{bmatrix} \frac{c_1 + c_2}{m_1} & -\frac{c_1 + c_2 e^{-ip}}{\sqrt{m_1 m_2}} \\ -\frac{c_1 + c_2 e^{ip}}{\sqrt{m_1 m_2}} & \frac{c_1 + c_2}{m_2} \end{bmatrix}, \qquad \mathbf{k} = p\tilde{\mathbf{b}}, \qquad \tilde{\mathbf{b}} = \frac{\mathbf{e}}{a}, \tag{3.184}$$

где **k** — волновой вектор;  $p \in [0; 2\pi]$ . Вычисление собственных чисел матрицы  $\boldsymbol{\Omega}$  дает дисперсионное соотношение:

$$\omega_{1,2}^2(p) = \frac{\omega_{max}^2}{2} \left( 1 \pm \sqrt{1 - \frac{16c_1c_2\sin^2\frac{p}{2}}{m_1m_2\omega_{max}^4}} \right), \quad \omega_{max}^2 = \frac{(c_1 + c_2)(m_1 + m_2)}{m_1m_2},$$
(3.185)

где индекс 1 соответствует знаку плюс в скобках. Функции  $\omega_1(p), \omega_2(p)$  называются оптической и акустической ветками дисперсионного соотношения соответственно. Отметим, что  $\omega_{1,2}/\omega_{max}$  одинаково зависят от  $m_1/m_2$  и  $c_1/c_2$ .

Групповые скорости вычисляются по определению (3.125). Проекция групповой скорости на направление цепочки при  $p \in (0; 2\pi)$  имеет вид

$$v_g^j = a \frac{\mathrm{d}\omega_j}{\mathrm{d}p}, \qquad v_g^1 = \frac{c_1 c_2 a \sin p}{m_1 m_2 \omega_1 (\omega_1^2 - \omega_2^2)}, \qquad v_g^2 = \frac{c_1 c_2 a \sin p}{m_1 m_2 \omega_2 (\omega_1^2 - \omega_2^2)}.$$
 (3.186)

Здесь  $\omega_j$  — неотрицательная частота в формуле (3.185). Максимальная группо-

вая скорость равна

$$v_* = \max_{p,j} \left( |v_g^j| \right) = a \sqrt{\frac{c_1 c_2}{(c_1 + c_2)(m_1 + m_2)}}.$$
(3.187)

Вычислим матрицу  $\boldsymbol{P}$ , входящую в формулы (3.124). По определению столбцы матрицы  $\boldsymbol{P}$  равны нормированным собственным векторам динамической матрицы  $\boldsymbol{\Omega}$ . Собственные векторы  $\boldsymbol{d}_{1,2}$ , соответствующие собственным числам  $\omega_1^2, \omega_2^2$ , имеют вид:

$$\boldsymbol{d}_{1,2} = \left[1 - \frac{m_1}{m_2} \pm \sqrt{\left(1 - \frac{m_1}{m_2}\right)^2 + 4|g|^2 \frac{m_1}{m_2}} - 2g\sqrt{\frac{m_1}{m_2}}\right]^\top, \qquad g = \frac{c_1 + c_2 e^{\mathrm{i}p}}{c_1 + c_2}.$$
(3.188)

Нормировка  $\boldsymbol{d}_{1,2}$  дает столбцы матрицы  $\boldsymbol{P}.$ 

В следующих параграфах формулы (3.185), (3.188) используются для вычисления кинетических энергий подрешеток  $T_{11}, T_{22}$ .

#### Ступенчатое начальное распределение энергии

В настоящем параграфе рассматривается ступенчатое начальное распределение энергии вида

$$T_0(x) = T_0(x)\mathbf{E}, \qquad T_0(x) = T_b + \Delta T H(x).$$
 (3.189)

В соответствии с формулой (3.189) начальные энергии подрешеток в каждой точке равны. В наших расчетах  $\Delta T = T_b$ . Заметим, что в силу линейности задачи величина  $\Delta T/T_b$  качественно не влияет на результаты. Напротив, в нелинейных цепочках  $\Delta T/T_b$  — важный дополнительный параметр, определяющий, насколько отличается влияние нелинейности на процесс переноса энергии в двух частях цепочки.

Аналитическое решение задачи о переносе энергии в цепочке с начальным полем (3.189) дано формулами (3.134), (3.143). При вычислении интегралы в формулах (3.134), (3.143) заменяются на суммы Римана. Интервал интегрирования делится на  $2 \cdot 10^4$  одинаковых участков. Для проверки формул (3.134),

(3.143) проведем сравнение с результатами численного решения уравнений динамики решетки (3.182) с начальными условиями (3.183), (3.189). Численное интегрирование проводится с использованием симплектического метода leap-frog с шагом по времени, равным  $5 \cdot 10^{-3} \tau_{min}$ . Из формул (3.134), (3.143) следует, что кинетические энергии на больших временах меняются самоподобным образом, т.е. зависят только от x/t. Следовательно, достаточно сравнить аналитические и численные результаты в один момент времени. Далее сравнение проводится при  $t = 500\tau_{min}$ , где  $\tau_{min} = 2\pi/\omega_{max}$ ,  $\omega_{max}$  определяется формулой (3.185). Ячейка периодичности цепочки состоит из  $10^4$  элементарных ячеек. В процессе моделирования вычисляются кинетические энергии  $T_{11}, T_{22}$  в каждой ячейке j:

$$2T_{11}(x_j) = m \left\langle \dot{u}_{1j}^2 \right\rangle_r, \qquad 2T_{22}(x_j) = m \left\langle \dot{u}_{2j}^2 \right\rangle_r, \qquad (3.190)$$

где  $\langle ... \rangle_r^{}$  — оператор осреднения по реализациям со случайными начальными условиями. В настоящем примере число реализаций составляет  $7 \cdot 10^4$ . Энергии подрешеток  $T_{11}, T_{22}$  в момент времени  $t = 500\tau_{min}$  для  $m_2 = 2m_1, c_1 = c_2$ показаны на рис. 3.14. Из рисунка видно, что численные результаты хорошо согласуются с аналитическим формулами (3.134), (3.143). Видно, что энергии подрешеток в центральной части графика существенно отличаются, несмотря на то, что в начальный момент времени они всюду одинаковы. Данный факт предсказывается формулами (3.134), (3.143).

Различие кинетических энергий подрешеток в стационарной задаче о переносе энергии в двухатомной цепочке также было обнаружено в работах [89, 90]. Результаты настоящей работы показывают, что в нестационарном случае энергии подрешеток также различны.

#### Синусоидальный профиль начальной энергии

В настоящем параграфе рассматривается затухание синусоидального профиля начальной энергии (3.145) в двухатомной цепочке. При этом, как и в предыду-



Рис. 3.14: Ступенчатое распределение энергии в цепочке при  $m_2 = 2m_1, c_1 = c_2$ . Показаны энергии подрешеток  $T_{11}$  (сплошная красная линия и квадраты) и  $T_{22}$  (пунктирная голубая линия и круги) в момент времени  $t = 500\tau_{min}$ . Линии соответствуют аналитическому решению (3.143). Квадраты и круги — результат численного интегрирования уравнений динамики.

щем параграфе, получается, что энергии подрешеток  $T_{11}, T_{22}$  отличаются. Начальное распределение кинетической энергии имеет вид:

$$T_0(x) = T_0(x)\mathbf{E}, \qquad T_0(x) = T_b + \Delta T \sin \frac{2\pi x}{L},$$
 (3.191)

где L — размер ячейки периодичности; расчеты проводятся при  $\Delta T = T_b/2$ . Отметим, что в соответствии с формулой (3.191) начальные кинетические энергии подрешеток в каждой элементарной ячейке совпадают. Аналитическое решение данной задачи дано формулой (3.146). Решение показывает, что пространственное распределение энергии в любой момент времени остается синусоидальным. Следовательно, достаточно вычислить матрицу A, определенную формулой (3.148). Элементы  $A_{11}, A_{22}$  данной матрицы соответствуют амплитудам энергий подрешеток  $T_{11}, T_{22}$ . Далее исследуется затухание данных амплитуд.

Аналитическое выражение для матрицы **A** дано формулой (3.149). Для расчета по формуле (3.149) интегралы в ней заменяются на суммы. При этом интервал интегрирования разбивается на 10<sup>3</sup> одинаковых отрезков. Ниже проводится сравнение результатов, получаемых на основе формулы (3.149), с численным решением уравнений движения. В компьютерном моделировании цепочка состоит из 10<sup>4</sup> элементарных ячеек при периодических граничных условиях. Уравнения движения (3.182) с начальными условиями (3.183), (3.191) решаются численно. В процессе моделирования матрица **A** вычисляется по формуле (3.148), где интеграл заменяется на суммирование по всем элементарным ячейкам, а энергии подрешеток вычисляются по формуле (3.190). Результирующее значение **A** усредняется по 10<sup>2</sup> реализациям. Отметим, что для достижения одинаковой точности в настоящем примере требуется меньше реализаций, чем в задаче, рассмотренной в предыдущем параграфе. Это связано с тем, что формула (3.148) содержит дополнительное осреднение по пространству, повышающее точность. Амплитуды  $A_{11}$ ,  $A_{22}$  кинетических энергий  $T_{11}$ ,  $T_{22}$  для  $m_2 = 2m_1$ ,  $c_1 = c_2$  показаны на рис. 3.15, 3.16. Графики показывают, что результаты численного моделирования с высокой точностью описываются приближенными аналитическими формулами (3.149).



Рис. 3.15: Амплитуда  $A_{11}$  синусоидального профиля энергии в двухатомной цепочке ( $m_2 = 2m_1, c_1 = c_2$ ) на малых временах (слева) и больших временах (справа). Аналитическое решение (3.149) (линия) и численное решение уравнений движения (квадраты). Здесь  $v_*$  — максимальная групповая скорость (3.187).

Таким образом, как и в предыдущем примере, кинетические энергии подрешеток при t > 0 отличаются  $(T_{11} \neq T_{22})$ , несмотря на то, что в начальный



Рис. 3.16: Амплитуда  $A_{22}$  синусоидального профиля энергии в двухатомной цепочке ( $m_2 = 2m_1, c_1 = c_2$ ) на малых временах (слева) и больших временах (справа). Аналитическое решение (3.149) (линия) и численное решение уравнений движения (треугольники). Здесь  $v_*$  — максимальная групповая скорость (3.187).

момент времени они равны. Отметим также, что затухание энергий происходит немонотонно.

#### 3.3.6.2 Пример. Графен (поперечные колебания)

В данном параграфе рассматривается баллистический перенос энергии в решетке графена (см. рис. 3.17). Учитываются только колебания, связанные с выходом из плоскости листа. При этом считается, что графеновый лист предварительно натянут [7, 13, 74]. Колебания в плоскости листа могут рассматриваться отдельно, т.к. в гармоническом приближении они не перевязаны с поперечными колебаниями. Основная задача данного раздела состоит в том, чтобы продемонстрировать анизотропию баллистического переноса энергии в решетке графена. Также будет показано, что формулы (3.124) описывают перенос энергии с высокой точностью. Дополнительно анализируются вклады акустических и оптических колебаний в перенос энергии.

#### Уравнения движения

В настоящем разделе уравнения поперечных колебаний растянутого графенового листа записываются в матричном виде. Решетка графена изображена на рисунке 3.17. Элементарные ячейки, содержащие по две частицы помечены парой индексов *i*, *j*. Базисные векторы решетки **b**<sub>1</sub>, **b**<sub>2</sub> представляются в декартовом



Рис. 3.17: Нумерация элементарных ячеек в графене. Здесь  $\mathbf{b}_1$ ,  $\mathbf{b}_2$  — базисные векторы решетки. Частицы движутся вдоль нормали к плоскости решетки. Оси x, y соответствуют направлениям зигзаг и кресло.

базисе следующим образом

$$\mathbf{b}_1 = \frac{\sqrt{3}a}{2} \left( \mathbf{i} + \sqrt{3}\mathbf{j} \right), \qquad \mathbf{b}_2 = \frac{\sqrt{3}a}{2} \left( \sqrt{3}\mathbf{j} - \mathbf{i} \right), \qquad (3.192)$$

где **i**, **j** — единичные векторы, направленные вдоль осей x и y соответственно; a — равновесное расстояние между ближайшими частицами. Вектор **b**<sub>1</sub> соединяет центры ячеек *i*, *j* и *i* + 1, *j*. Вектор **b**<sub>2</sub> соединяет центры ячеек *i*, *j* и *i*, *j* + 1. Радиус-вектор ячейки *i*, *j* представляется через базисные векторы:

$$\mathbf{x}_{i,j} = i\mathbf{b}_1 + j\mathbf{b}_2. \tag{3.193}$$

Каждая частица имеет одну степень свободы (перемещение по нормали к

плоскости решетки). Перемещения частиц элементарной ячейки *i*, *j* образуют столбец:

$$\boldsymbol{u}_{i,j} = \boldsymbol{u}(\mathbf{x}_{i,j}) = \begin{bmatrix} u_{i,j}^1 & u_{i,j}^2 \end{bmatrix}^\top, \qquad (3.194)$$

где  $u_{i,j}^1, u_{i,j}^2$  — перемещения частиц, принадлежащих двум подрешеткам.

Запишем уравнение движения элементарной ячейки *i*, *j*. Каждая частица связана с тремя ближайшими соседями линейными пружинками, обозначенными линиями на рис. 3.17). Равновесная длина пружинки меньше начального расстояния между частицами, иными словами пружинки изначально растянуты. При отсутствии натяжения поперечные колебания графена становятся существенно нелинейными [11]. Жесткость пружинки, определяемую силой натяжения листа, будем обозначать *c*. Тогда уравнения движения принимают вид:

$$\boldsymbol{M}\ddot{\boldsymbol{u}}_{i,j} = \boldsymbol{C}_{2}\boldsymbol{u}_{i,j+1} + \boldsymbol{C}_{1}\boldsymbol{u}_{i+1,j} + \boldsymbol{C}_{0}\boldsymbol{u}_{i,j} + \boldsymbol{C}_{-1}\boldsymbol{u}_{i-1,j} + \boldsymbol{C}_{-2}\boldsymbol{u}_{i,j-1},$$

$$\boldsymbol{M} = m\mathbf{E}, \quad \boldsymbol{C}_{0} = \begin{bmatrix} -3c & c \\ c & -3c \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{C}_{1} = \boldsymbol{C}_{2} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ c & 0 \end{bmatrix}, \qquad (3.195)$$

Здесь  $\boldsymbol{C}_{-1} = \boldsymbol{C}_{1}^{\top}, \, \boldsymbol{C}_{-2} = \boldsymbol{C}_{2}^{\top}; \, m$  — масса частицы.

В начальный момент времени частицы имеют случайные скорости и нулевые перемещения. В рамках настоящего пункта мы ограничиваемся рассмотрением случая, когда начальные энергии подрешеток равны  $(T_{11}^0 = T_{22}^0 = T_0)$ :

$$\boldsymbol{T}_0(x_{i,j}, y_{i,j}) = T_0(x_{i,j}, y_{i,j}) \mathbf{E}, \qquad (3.196)$$

где  $x_{i,j}, y_{i,j}$  — декартовы координаты вектора  $\mathbf{x}_{i,j}$ . Соответствующие начальные условия для частиц имеют вид:

$$u_{i,j}^{1} = u_{i,j}^{2} = 0, \quad \dot{u}_{i,j}^{1} = \beta_{i,j} \sqrt{\frac{2}{m} T_{0}(x_{i,j}, y_{i,j})}, \quad \dot{u}_{i,j}^{2} = \gamma_{i,j} \sqrt{\frac{2}{m} T_{0}(x_{i,j}, y_{i,j})}, \quad (3.197)$$

где  $\beta_{i,j}, \gamma_{i,j}$  — некоррелированные случайные величины с нулевым средним и

единичной дисперсией, т.е.  $\left< \beta_{i,j} \right> = \left< \gamma_{i,j} \right> = 0, \left< \beta_{i,j}^2 \right> = \left< \gamma_{i,j}^2 \right> = 1, \left< \beta_{i,j} \gamma_{s,p} \right> = 0$  для всех i, j, s, p. Далее рассматривается изменение поля полной кинетической энергии  $T = \frac{1}{2} (T_{11} + T_{22})$  во времени.

#### Дисперсионное соотношение и групповые скорости

В настоящем пункте вычисляются дисперсионное соотношение, поляризационная матрица **Р** (см. формулу (3.110)) и групповые скорости.

Динамическая матрица  $\boldsymbol{\Omega}$  вычисляется по формуле (3.108). Подстановка выражений (3.195) для матриц  $\boldsymbol{M}, \boldsymbol{C}_{\alpha}, \alpha = 0; \pm 1; \pm 2$  в формулу (3.108) дает

$$\boldsymbol{\Omega} = \omega_*^2 \begin{bmatrix} 3 & -1 - e^{-\mathbf{i}p_1} - e^{-\mathbf{i}p_2} \\ -1 - e^{\mathbf{i}p_1} - e^{\mathbf{i}p_2} & 3 \end{bmatrix}, \qquad p_1 = \mathbf{k} \cdot \mathbf{b}_1, \quad p_2 = \mathbf{k} \cdot \mathbf{b}_2,$$
(3.198)

где  $\mathbf{k}$  — волновой вектор;  $\omega_*^2 = \frac{c}{m}$ ;  $p_1, p_2 \in [0; 2\pi]$  — безразмерные компоненты волнового вектора.

Собственные числа  $\omega_1^2, \omega_2^2$  матрицы **\Omega** определяют дисперсионное соотношение решетки. Решение задачи на собственные значения дает:

$$\omega_{1,2}^2 = \omega_*^2 \left(3 \pm R(p_1, p_2)\right), \quad R(p_1, p_2) = \sqrt{3 + 2\left(\cos p_1 + \cos p_2 + \cos\left(p_1 - p_2\right)\right)},$$
(3.199)

где индекс 1 соответствует знаку плюс. Функции  $\omega_1(p_1, p_2), \omega_2(p_1, p_2)$  называются оптической и акустической дисперсионными поверхностями соответственно. Нормированные собственные векторы матрицы  $\boldsymbol{\Omega}$  дают столбцы поляризационной матрицы  $\boldsymbol{P}$ :

$$\boldsymbol{P} = \frac{1}{\sqrt{|b|^2 + b^2}} \begin{bmatrix} |b| & |b| \\ -b & b \end{bmatrix}, \qquad b = 1 + e^{ip_1} + e^{ip_2}. \tag{3.200}$$

Групповые скорости  $\mathbf{v}_g^1, \mathbf{v}_g^2$  для  $p_1, p_2 \in (0; 2\pi)$  вычисляются по определе-

нию (3.125):

$$\mathbf{v}_{g}^{j} = \frac{\partial\omega_{j}}{\partial\mathbf{k}} = \frac{\partial\omega_{j}}{\partial p_{1}}\mathbf{b}_{1} + \frac{\partial\omega_{j}}{\partial p_{2}}\mathbf{b}_{2},$$

$$\frac{\partial\omega_{1}}{\partial p_{1}} = \frac{-\omega_{*}^{2}\left(\sin p_{1} + \sin(p_{1} - p_{2})\right)}{2\omega_{1}R(p_{1}, p_{2})}, \qquad \frac{\partial\omega_{2}}{\partial p_{1}} = \frac{\omega_{*}^{2}\left(\sin p_{1} + \sin(p_{1} - p_{2})\right)}{2\omega_{2}R(p_{1}, p_{2})},$$

$$\frac{\partial\omega_{1}}{\partial p_{2}} = \frac{-\omega_{*}^{2}\left(\sin p_{2} - \sin(p_{1} - p_{2})\right)}{2\omega_{1}R(p_{1}, p_{2})}, \qquad \frac{\partial\omega_{2}}{\partial p_{2}} = \frac{\omega_{*}^{2}\left(\sin p_{2} - \sin(p_{1} - p_{2})\right)}{2\omega_{2}R(p_{1}, p_{2})}.$$

$$(3.201)$$

Здесь  $\omega_1 \ge 0, \omega_2 \ge 0$ ; функция  $R(p_1, p_2)$  определена формулой (3.199); базисные векторы  $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$  заданы формулой (3.192).

В соответствии с формулами (3.201) максимальные абсолютные значения групповых скоростей, соответствующих акустической и оптической веткам дисперсионного соотношения, имеют вид:

$$\max_{p_1, p_2} |\mathbf{v}_g^1| \approx 0.448 v_*, \qquad \max_{p_1, p_2} |\mathbf{v}_g^2| \approx 0.897 v_*, \qquad v_* = \omega_* a. \tag{3.202}$$

Далее формулы (3.198), (3.199), (3.200), (3.201) используются для описания баллистического переноса энергии.

## Круговое начальное распределение энергии. Анизотропия переноса энергии

В настоящем пункте демонстрируется анизотропия баллистического переноса энергии в графене. Также анализируются вклады акустических и оптических колебаний в перенос энергии.

В начальный момент времени кинетическая энергия имеет постоянное значение  $T_1$  в круге радиуса R и равна нулю вне круга:

$$\boldsymbol{T}_{0} = T_{0}(x, y)\mathbf{E}, \qquad T_{0}(x, y) = \begin{cases} T_{1}, & x^{2} + y^{2} \le R^{2}, \\ 0, & x^{2} + y^{2} > R^{2}. \end{cases}$$
(3.203)

В дальнейших вычислениях R = 10a. Аналитическое решение задачи с таким распределением начальной энергии вычисляется по формуле (3.135). Интегралы в формуле (3.135) берутся численно с использованием кусочно-постоянной аппроксимации. Для этого область интегрирования разделяется на  $300 \times 300$  одинаковых квадратных ячеек.

В компьютерном моделировании рассматривается квадратный графеновый лист с длиной стороны L = 300a. Уравнения динамики решетки (3.195) с начальными условиями (3.197), (3.203) решаются численно с использованием метода leap-frog с шагом по времени  $5 \cdot 10^{-3} \tau_*$ ,  $\tau_* = 2\pi/\omega_*$ . Кинетические энергии всех элементарных ячеек  $T(x_{i,j}, y_{i,j})$  в момент времени  $t = 20\tau_*$  вычисляются по формуле

$$T(x_{i,j}, y_{i,j}) = \frac{1}{2}m \left\langle \left( \dot{u}_{i,j}^1 \right)^2 + \left( \dot{u}_{i,j}^2 \right)^2 \right\rangle_r, \qquad (3.204)$$

где осреднение проводится по реализациям со случайными начальными условиями. Момент времени  $t = 20\tau_*$  выбран таким образом, что колебаниями, связанными с перераспределением энергии между кинетической и потенциальной, можно пренебречь. Поля кинетической энергии, осредненные по  $10, 10^2, 10^3$  и  $10^4$  реализаций, показаны на рис. 3.18. С увеличением числа реализаций результаты численного моделирования сходятся к аналитическому решению, заданному формулой (3.135). Для  $10^4$  реализаций аналитические и численные результаты визуально неразличимы.

Рисунок 3.18 показывает, в частности, что фронт энергии имеет форму окружности, что соответствует формуле (3.141) и принципу Гюйгенса. В то же время поле кинетической энергии имеет симметрию решетки; иными словами, перенос энергии существенно анизотропен.

В соответствии с формулой (3.135) поле кинетической энергии определяется вкладами акустических и оптических колебаний. Данные вклады показаны на рис. 3.19. Скорости акустических волн больше, чем оптических (см. например формулу (3.202)). Поэтому фронт на левом рисунке продвинулся дальше 3.19.



Рис. 3.18: Поле кинетической энергии в графене в момент времени  $t = 20\tau_*$ . Показаны результаты осреднения численного решения по 10,  $10^2$ ,  $10^3$ ,  $10^4$  реализаций. Начальная кинетическая энергия равна  $T_1$  внутри круга радиуса R = 10aи равна нулю в остальных точках (см. формулу (3.203)). Цветовая шкала показывает  $T/T_1$ .

Таким образом, формула (3.135) описывает анизотропный перенос энергии в графене с высокой точностью. В отличие от численного моделирования, формула (3.135) позволяет по отдельности анализировать вклад акустических и оптических колебаний.

#### Ступенчатое начальное распределение энергии

В настоящем пункте рассматривается контакт двух полуплоскостей с начальными энергиями  $T_b$  и  $2T_b$  (см. формулу (3.142)). Энергии подрешеток в каждой точке равны. Для того чтобы еще раз продемонстрировать анизотропию переноса энергии в графене, рассматривается две задачи с профилями в направлениях



Рис. 3.19: Вклады акустических (слева) и оптических (справа) колебаний в перенос энергии в графене при  $t = 20\tau_*$ . Начальная кинетическая энергия равна  $T_1$  внутри круга радиуса R = 10a и равна нулю в остальных точках (см. формулу (3.203)). Знак плюс означает, что результирующее поле кинетической энергии равно сумме полей, соответствующих акустическим и оптическим колебаниям. Цветовая шкала показывает  $T/T_1$ .

зигзаг (x) и кресло (y):

$$T_0 = T_0(x, y)\mathbf{E},$$
  $T_0(x, y) = T_b(1 + H(x))$  or  $T_0(x, y) = T_b(1 + H(y)).$   
(3.205)

Аналитическое решение задачи с таким распределением начальной кинетической энергии дано формулой (3.144).

Для проверки формул (3.144) результаты сравниваются с численным решением уравнений динамики решетки. Формула (3.144) показывает, что на больших временах решение автомодельно. Следовательно, достаточно рассмотреть поле энергии в один момент времени. В наших расчетах выбран момент времени  $t = 20\tau_*$ . Моделирование проводится для графенового листа, содержащего  $301 \times 348$  элементарных ячеек. Частицы имеют случайные начальные скорости, соответствующие распределению кинетической энергии (3.205), и нулевые перемещения. В обоих направлениях используются периодические граничные



Рис. 3.20: Перенос энергии в графене при ступенчатом начальном распределении. Показаны решения двух задач с распределениями энергии в направлениях x (сплошная красная линия) и y (пунктирная голубая линия) в момент времени  $t = 19.5\tau_*$ . Аналитическое решение (3.144) (линии) и результаты численного решения уравнений динамики (квадраты и кресты). Здесь  $v_* = \omega_* a$ .

условия. В процессе моделирования вычисляются кинетические энергии всех элементарных ячеек. Результаты осредняются по  $1.5 \cdot 10^3$  реализаций со случайными начальными условиями. Распределение кинетической энергии в направлениях x и y показаны на рис. 3.20. Видно, что численные результаты с высокой точностью описываются приближенными формулами (3.124).

#### Синусоидальное распределение кинетической энергии

В настоящем пункте рассматривается затухание синусоидального распределения начальной кинетической энергии (3.145) в графене. Исследуется анизотропия переноса энергии. Для этого рассматриваются решения двух задач с кинетическими энергиями, меняющимися в направлениях зигзаг (x) и кресло (y):

$$T_0 = T_0(x, y)\mathbf{E}, \qquad T_0(x, y) = T_b + \Delta T \sin \frac{2\pi x}{L} \quad \text{or} \quad T_0(x, y) = T_b + \Delta T \sin \frac{2\pi y}{L},$$
(3.206)

где L — размер ячейки периодичности,  $\Delta T = T_b/2$ .

Аналитическое решение задачи с начальным полем кинетической энергии (3.206) дано формулой (3.146). Решение показывает, что профиль кинетической энергии остается синусоидальным. Следовательно, достаточно вычислить амплитуду, A, (см. формулу (3.148)). Аналитическое выражение для Aдано второй из формул (3.149). Интегралы в формуле (3.149) берутся численно. Интервал интегрирования разбивается на 200 × 200 одинаковых элементов, в пределах которых подынтегральное выражение считается постоянным.

Для проверки точности формулы (3.149) проводится сравнение с результатами численного решения уравнений динамики решетки. Частицы имеют случайные начальные скорости, соответствующие распределению температуры (3.206). Начальные перемещения частиц равны нулю. В обоих направлениях используются периодические граничные условия. Ячейка периодичности содержит 200 × 232 элементарных ячеек. В процессе моделирования вычисляется амплитуда синусоидального распределения A (см. формулу (3.148)):

$$A = \frac{2}{L^2} \int_0^L \int_0^L T(x, y) \sin \frac{2\pi x}{L} dx dy \quad \text{or} \quad A = \frac{2}{L^2} \int_0^L \int_0^L T(x, y) \sin \frac{2\pi y}{L} dx.$$
(3.207)

Интеграл в формуле (3.207) заменяется суммой по элементарным ячейкам. Зависимость безразмерной амплитуды,  $A/\Delta T$ , от безразмерного времени,  $c_*t/L$ , показана на рис. 3.21. Каждый круг на графике соответствует среднему по реализациям. Рисунок 3.21 показывает, что аналитическое решение (3.149) практически совпадает с результатами численного моделирования. Изменения кинетической энергии, соответствующие распределениям в направлениях x и y,



Рис. 3.21: Амплитуда, A, синусоидального распределения кинетической энергии в графене на малых временах (слева) и больших временах (справа). Показаны решения двух задач с распределениями энергии в направлениях зигзаг (красная линия) и кресло (голубая линия). Аналитическое решение (3.149) (линии) и результаты численного решения уравнений динамики (квадраты и треугольники). Здесь  $v_* = \omega_* a$ .

практически совпадают при  $t \leq L/v_*$  и существенно отличаются при  $t > L/v_*$ .

Таким образом, аналитическое решение (3.149) показывает, что затухание амплитуды синусоидального поля кинетической энергии в направлениях зигзаг и кресло немонотонно. Схожее немонотонное затухание было обнаружено экспериментально в поликристаллическом графите [80] при температурах  $T_b \sim 100K$  и размерах порядка  $L \sim 1 \mu m$ . Кроме того, как и в предыдущих задачах, проявляется анизотропия переноса энергии — затухание возмущений в направлениях зигзаг и кресло описывается разными функциями.

#### 3.3.7 Результаты параграфа 3.3

В настоящем параграфе с использованием точного решения уравнений движения получены формулы (3.124), (3.135), с высокой точностью описывающие изменение поля кинетической энергии в бесконечных линейных сложных решетках, элементарная ячейка которых имеет произвольное число степеней свободы. Показано, что матрица, характеризующая кинетические энергии элементарной ячейки, может быть представлена в виде суммы двух слагаемых, имеющих различные характерные времена.

На малых временах поведение кинетической энергии в различных пространственных точках можно считать практически независимым. В каждой точке кинетические энергии, соответствующие степеням свободы элементарной ячейки, совершают высокочастотные затухающие колебания и в общем случае стремятся к различным равновесным значениям. Колебания вызваны переходными процессами, описанными в предыдущей главе: уравниванием кинетической и потенциальной энергий и перераспределением кинетической энергии по степеням свободы элементарной ячейки. В бесконечных кристаллах колебания затухают на временах порядка 100 периодов колебаний атомов. В конечных кристаллах полное затухание не происходит и наблюдается явление теплового эха, введенное в работе [156].

Изменение поля кинетической энергии на больших временах связано с баллистическим переносом энергии. Как и в скалярных решетках, поле кинетической энергии на больших временах представляется в виде суперпозиции волн, имеющих форму начального распределения энергии и распространяющихся с групповыми скоростями, зависящими от волнового вектора. Следовательно, формулы (3.124), (3.135) явно демонстрируют волновую природу переноса энергии в баллистическом режиме.

Отметим, что локальные кинетические энергии, соответствующие степеням свободы элементарной ячейки, на больших временах в общем случае не равны. Более того, они не совпадают со своими равновесными значениями, получающимися в однородном случае. Следовательно, состояние элементарных ячеек, до которых доходит возмущение, становится существенно неравновесным (см. например, рисунки 3.14, 3.15, 3.16). Формула (3.124) для кинетической энергии имеет то же свойство, что и уравнения движения: она симметрична относительно замены t на -t. В то же время процессы в бесконечных гармонических

кристаллах необратимы.

Результаты, полученные в данном параграфе, опубликованы в работах [117, 120].

## 3.4 Подвод энергии в цепочку на упругом основании

В предыдущих параграфах данной главы рассматривалась ситуация, при которой начальное распределение кинетической энергии в упругом твердом теле задавалось в начальный момент времени за счет случайных скоростей частиц. В настоящем параграфе на примере одномерной цепочки на упругом основании рассматривается процесс подвода энергии в систему при кинематическом и силовом нагружении.

#### 3.4.1 Уравнение движения и начальные условия

Рассмотрим задачу о подводе энергии в гармоническую цепочку, состоящую из одинаковых частиц, соединенных пружинками жесткости K > 0 и находящуюся на упругом основании с жесткостью k > 0. Задача решается при периодических граничных условиях. Ячейка периодичности содержит N частиц, пронумерованных индексом n = 0, ..., N - 1.



Рис. 3.22: Периодическая ячейка, содержащая N = 7 частиц.

Отметим, что в гармоническом приближении продольные и поперечные колебания растянутой цепочки описываются одним и тем же уравнением, поэтому приведенные ниже результаты можно использовать для обоих видов колебаний.

Рассматриваются два типа воздействия на систему — силовой и кинематический. При силовом воздействии к частице n = 0 прикладывается гармоническая внешняя сила с амплитудой  $A_f$  и частотой  $\omega$ . Тогда уравнения движения частиц имеют вид

$$m\ddot{u}_n = K(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) - ku_n + A_f \sin(\omega t)\delta_n, \qquad (3.208)$$

где m — масса частицы;  $\delta_0 = 1$  и  $\delta_n = 0$  для  $n \neq 0$ .

В случае кинематического нагружения частица n = 0 перемещается по закону:

$$u_0 = A_d \sin(\omega t). \tag{3.209}$$

Движение остальных частиц описывается уравнением

$$m\ddot{u}_n = K(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) - ku_n, \qquad n \neq 0.$$
(3.210)

При обоих типах нагружения используются нулевые начальные условия и периодические граничные условия:

$$u_n = 0, \qquad \dot{u}_n = 0, \qquad u_n = u_{n+N}.$$
 (3.211)

Дисперсионное соотношение для цепочки получается с использованием подстановки  $u_n = Ae^{i(\Omega t + pn)}$ :

$$\Omega^{2}(p) = \omega_{\min}^{2} + \left(\omega_{\max}^{2} - \omega_{\min}^{2}\right)\sin^{2}\frac{p}{2}, \qquad \omega_{\min}^{2} = \frac{k}{m}, \qquad \omega_{\max}^{2} = \frac{4K + k}{m}. \quad (3.212)$$

Соответствующая групповая скорость  $v_g$ имеет вид:

$$v_g = \left| \frac{\mathrm{d}\Omega}{\mathrm{d}\mathbf{k}} \right| = \frac{a}{2\Omega} \sqrt{\left(\Omega^2 - \omega_{\min}^2\right) \left(\omega_{\max}^2 - \Omega^2\right)}, \qquad \mathbf{k} = \frac{p}{a} \mathbf{e}, \tag{3.213}$$

где е — единичный вектор, направленный вдоль цепочки; a — постоянная решетки. Формула (3.213) показывает, что групповая скорость обращается в ноль при  $\Omega = \omega_{\min}$  (для  $\omega_{\min} \neq 0$ ) и  $\Omega = \omega_{\max}$ . Например, зависимости групповой скорости от волнового вектора для k/K = 0, 0.5, 1, 2 показаны на рис. 3.23. Далее рассматриваются частоты  $\omega$  внутри спектра, т.е.  $\omega \in [\omega_{\min}; \omega_{\max}]$ . Для



Рис. 3.23: Дисперсионное соотношение (слева) и групповая скорость (справа) для разных жесткостей упругого основания k/K = 0 (сплошная линия), 0.5 (пунктирная линия), 1 (штриховая линия), 2 (штрих-пунктир).

остальных частот энергия в цепочку не передается.

Для примера рассмотрим численное решение уравнений движения (3.210) при кинематическом нагружении. Численное интегрирование производится с использованием метода leap-frog с шагом  $0.01/\omega_*$ ,  $\omega_* = \sqrt{K/m}$ . Рассматриваются две частоты внешнего воздействия  $\omega = 0.1\omega_*$  и  $\omega = \omega_*$ . Перемещения цепочки, состоящей из N = 600 частиц, в момент времени  $t = 250/\omega_*$  показаны на рис. 3.24. В силу симметрии показана только половина системы. Кинематическое воздействие создает два волновых пакета, распространяющихся



Рис. 3.24: Перемещения частиц цепочки при кинематическом нагружении при  $t = 250\omega_*^{-1}$ ,  $\omega = 0.1\omega_*$  (слева) и  $\omega = \omega_*$  (справа). Показана половина цепочки. Штриховые линии  $x = v_g t$  показывают распространение энергии с групповыми скоростями.

в противоположных направлениях. При малых частотах ( $\omega = 0.1\omega_*$ ) влияние дисперсии слабо заметно (для k = 0). Профиль волны близок к синусоидальному. Групповая скорость близка к фазовой (разница порядка 1%). Для более высокой частоты  $\omega = \omega_*$  эффект дисперсии более заметен. В частности, разница между фазовой и групповой скоростями составляет около 14%. Энергия распространяется медленнее, чем фронт волны. При силовом нагружении аналогичные эффекты наблюдаются для волны деформаций.

Далее рассматривается скорость подвода энергии в систему в зависимости от частоты возбуждения  $\omega$ . Энергия системы вычисляется с использованием точных решений уравнений (3.208) и (3.210).

#### 3.4.2 Подвод энергии при силовом нагружении

При силовом нагружении решение (3.208) строится с использованием дискретного преобразования Фурье:

$$\hat{u}_j = \Phi\left(u_n\right) = \sum_{n=0}^{N-1} u_n e^{-i\frac{2\pi jn}{N}}, \qquad u_n = \Phi^{-1}\left(\hat{u}_j\right) = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} \hat{u}_j e^{i\frac{2\pi jn}{N}}.$$
 (3.214)

Применяя дискретное преобразование Фурье к уравнению (3.208) с использованием тождества  $\Phi(\delta_n) = 1$ , получим уравнения для  $\hat{u}_j$ :

$$\ddot{\hat{u}}_j = -\Omega_j^2 \hat{u}_j + \frac{A_f}{m} \sin(\omega t), \qquad \Omega_j = \Omega\left(\frac{2\pi j}{N}\right). \tag{3.215}$$

Здесь функция Ω определена формулой (3.212). Решение данных уравнений с учетом нулевых начальных условий дает:

$$\hat{u}_j = \frac{A_f}{m(\Omega_j^2 - \omega^2)} \left( \sin(\omega t) - \frac{\omega}{\Omega_j} \sin(\Omega_j t) \right).$$
(3.216)

Вычисляя обратное преобразование Фурье, получим перемещение частицы n = 0:

$$u_0 = \frac{A_f}{mN} \sum_{j=0}^{N-1} \frac{\Omega_j \sin(\omega t) - \omega \sin(\Omega_j t)}{\Omega_j (\Omega_j^2 - \omega^2)}.$$
(3.217)

Энергия системы вычисляется с использованием уравнения баланса энергии. В соответствии с данным законом энергия равна работе внешней силы на перемещении частицы n = 0:

$$U = A_f \int_0^t \sin(\omega\tau) \dot{u}_0(\tau) d\tau. \qquad (3.218)$$

Подстановка решения (3.217) в формулу (3.218) дает точное выражение для
полной энергии системы:

$$U = \frac{A_f^2}{mN} \left( \frac{\sin^2(\omega t)}{2} \sum_{j=0}^{N-1} \frac{1}{\Omega_j^2 - \omega^2} + \omega \sum_{j=0}^{N-1} \frac{\omega - \Omega_j \sin(\omega t) \sin(\Omega_j t) - \omega \cos(\omega t) \cos(\Omega_j t)}{(\Omega_j^2 - \omega^2)^2} \right).$$
(3.219)

Далее исследуется поведение энергии длинной цепочки на больших временах  $(N \to \infty, t \to \infty)$ .

Рассмотрим предел  $N \to \infty$  в формуле (3.219). В таком случае суммы можно аппроксимировать интегралом по переменной  $p = 2\pi j/N$ , меняющейся в интервале  $p \in [0; 2\pi]$ . Ниже будет показано, что второе слагаемое в формуле (3.219) растет со временем при  $\omega \in [\omega_{\min}; \omega_{\max}]$ . Первое слагаемое ограничено, поэтому оно отбрасывается. В результате выражение для энергии принимает вид

$$U \approx \frac{A_f^2 \omega}{\pi m} \int_0^\pi \frac{\omega - \Omega \sin(\omega t) \sin(\Omega t) - \omega \cos(\omega t) \cos(\Omega t)}{(\Omega^2 - \omega^2)^2} \mathrm{d}p.$$
(3.220)

Заменим в формуле (3.220) интегрирование по волновому числу p на интегрирование по частотам  $\Omega$ :

$$U \approx \frac{A_f^2 \omega a}{\pi m} \int_{\omega_{\min}}^{\omega_{\max}} \frac{\omega - \Omega \sin(\omega t) \sin(\Omega t) - \omega \cos(\omega t) \cos(\Omega t)}{v_g(\Omega) (\Omega^2 - \omega^2)^2} d\Omega, \qquad (3.221)$$

где  $v_g$  — групповая скорость (3.213).

Основной вклад в интеграл (3.221) дает особенная точка  $\Omega = \omega$ . Введем новую переменную  $\epsilon = \Omega - \omega$  и воспользуемся соотношением:

$$\omega - \Omega \sin(\omega t) \sin(\Omega t) - \omega \cos(\omega t) \cos(\Omega t) =$$

$$= 2\omega \sin^2 \frac{\epsilon t}{2} - \frac{\epsilon}{2} \left( 2\cos(\epsilon t) \cos^2(\omega t) - \sin(\omega t) \sin(\epsilon t) \right).$$
(3.222)

Можно показать, что основной вклад в асимптотику дает первое слагаемое в правой части (3.222). В окрестности точки  $\epsilon = 0$  знаменатель в формуле (3.221)

представляется в виде

$$\Omega^2 - \omega^2 \approx 2\omega\epsilon. \tag{3.223}$$

Далее рассматривается интегрирование по малой  $\delta$ -окрестности точки  $\epsilon = 0$ . В результате выражение для энергии принимает вид

$$U \approx \frac{A_f^2 a}{2\pi m v_g(\omega)} \int_{-\delta}^{+\delta} \frac{\sin^2 \frac{\epsilon t}{2}}{\epsilon^2} d\epsilon = \frac{A_f^2 a t}{2\pi m v_g(\omega)} \int_{-\delta t}^{+\delta t} \frac{\sin^2 \frac{x}{2}}{x^2} dx.$$
(3.224)

При больших t интеграл в правой части стремится к  $\frac{\pi}{2}$ , поэтому формула (3.224) принимает окончательный вид:

$$U \approx \frac{A_f^2 a t}{4 m v_g(\omega)}.$$
(3.225)

Формула (3.225) показывает, что энергия линейно растет во времени при  $\omega \in (\omega_{\min}; \omega_{\max})$ . Скорость роста энергии обратно пропорциональна групповой скорости.

Отметим, что формула (3.225) неприменима при нулевой групповой скорости (для  $\omega = \omega_{\min} \neq 0$ ) и  $\omega = \omega_{\max}$ ). В таких случаях выражение для энергии имеет вид

$$U \approx \frac{A_f^2 \sqrt{\omega_{\min}}}{3m\sqrt{\pi(\omega_{\max}^2 - \omega_{\min}^2)}} t^{\frac{3}{2}}, \qquad \omega = \omega_{\min},$$
  
$$U \approx \frac{A_f^2 \sqrt{\omega_{\max}}}{3m\sqrt{\pi(\omega_{\max}^2 - \omega_{\min}^2)}} t^{\frac{3}{2}}, \qquad \omega = \omega_{\max}.$$
  
(3.226)

Для проверки асимптотической формулы (3.225) проведем сравнение с результатами численного решения уравнений движения (3.208). Шаг интегрирования равен  $0.01/\omega_*$ . Зависимость мощности источника энергии (U/t) от частоты внешнего воздействия  $\omega$  для  $k/K = 0, 0.5, 1, 2, t = 500/\omega_*$ , N = 2000,  $A_f m/(Ka) = 1$  показана на рис. 3.25. Рисунок 3.25 показывает, что формула (3.225) с высокой точностью описывает рост энергии. Видно, что U/t стремится к бесконечности при  $\omega = \omega_{\min} \neq 0$ ) и  $\omega = \omega_{\max}$ . Данный факт следует из асимптотических формул (3.226).



Рис. 3.25: Зависимость скорости роста энергии от частоты силового нагружения для k/K = 0, 0.5, 1, 2. Нижняя кривая соответствует k = 0. Точное решение (3.219) (сплошная линия), приближенная формула (3.225) (круги) и численное решение уравнений движения (квадраты).

Таким образом, скорость подвода энергии в цепочку при силовом нагружении может быть вычислена по простым формулам (3.225), (3.226).

#### 3.4.3 Подвод энергии при кинематическом нагружении

В настоящем параграфе рассматривается поведение цепочки, в которой частица n = 0 движется по закону  $u_0 = A_d \sin(\omega t)$ , где  $A_d$  и  $\omega$  — амплитуда и частота перемещения. Соответствующее уравнение движения цепочки задано формулой (3.210). Отметим, что в данном случае дискретное преобразование Фурье неприменимо, поэтому решение ищется в виде разложения по собственным формам.

Рассмотрим подвижную систему отсчета, связанную с частицей n = 0. Перемещения частиц по отношению к данной системе отсчета обозначаются  $w_n$ :

$$w_n = u_n - A_d \sin(\omega t). \tag{3.227}$$

Переменная  $w_n$  удовлетворяет уравнению

$$m\ddot{w}_{n} = K(w_{n+1} - 2w_{n} + w_{n-1}) - kw_{n} + A_{d}(m\omega^{2} - k)\sin(\omega t), \quad w_{0} = w_{N} = 0$$
(3.228)

с начальными условиями

$$w_n = 0, \qquad \dot{w}_n = -A_d \omega, \qquad n = 1, .., N - 1.$$
 (3.229)

В движущейся системе отсчета цепочка имеет фиксированные граничные условия. Нетрудно показать, что собственными формами в таком случае являются функции  $\sin \frac{\pi jn}{N}$ . Тогда решение  $w_n(t)$  представляется в виде

$$w_n = \sum_{j=1}^{N-1} \phi_j(t) \sin \frac{\pi j n}{N}.$$
 (3.230)

Подставим (3.230) в уравнение (3.228), домножим обе части на  $\sin \frac{\pi sn}{N}$  и просуммируем по n = 1, ..., N - 1. Тогда получим уравнения для  $\phi_j, j = 1..N - 1$ :

$$\ddot{\phi}_j = -\Omega_j^2 \phi_j + A_d (\omega^2 - \omega_{\min}^2) \frac{\beta_j}{\alpha_j} \sin(\omega t), \qquad \Omega_j = \Omega\left(\frac{\pi j}{N}\right). \tag{3.231}$$

Здесь коэффициенты  $\alpha_j$ ,  $\beta_j$  имеют вид:

$$\alpha_j = \sum_{n=1}^{N-1} \sin^2 \frac{\pi j n}{N} = \frac{N}{2}, \qquad \beta_j = \sum_{n=1}^{N-1} \sin \frac{\pi j n}{N} = \frac{1 - (-1)^j}{2} \operatorname{ctg} \frac{\pi j}{2N}. \tag{3.232}$$

При выводе формулы (3.231) использована ортогональность собственных форм  $\sum_{n=1}^{N-1} \sin \frac{\pi sn}{N} \sin \frac{\pi jn}{N} = \alpha_s \delta_{js}$ . Применим аналогичное преобразование к начальным условиям (3.229):

$$\phi_j(0) = 0, \qquad \dot{\phi}_j(0) = -\frac{\beta_j}{\alpha_j} A_d \omega. \tag{3.233}$$

Решая уравнения (3.231) с начальными условиями (3.233), получим:

$$\phi_j = \frac{A_d \beta_j}{\alpha_j (\Omega_j^2 - \omega^2)} \left( (\omega^2 - \omega_{\min}^2) \sin(\omega t) - \frac{\omega}{\Omega_j} (\Omega_j^2 - \omega_{\min}^2) \sin(\Omega_j t) \right). \quad (3.234)$$

Подстановка решения (3.234) в формулу (3.230) дает выражение для перемещений частиц:

$$w_n = \frac{A_d}{N} \sum_{j=1}^{N-1} B_j \left( \left( \omega^2 - \omega_{\min}^2 \right) \sin(\omega t) - \frac{\omega}{\Omega_j} (\Omega_j^2 - \omega_{\min}^2) \sin(\Omega_j t) \right) \sin\frac{\pi j n}{N},$$
  

$$B_j = \frac{(1 - (-1)^j) \operatorname{ctg} \frac{\pi j}{2N}}{\Omega_j^2 - \omega^2}.$$
(3.235)

Формула (3.235) — точное решение начальной задачи (3.228), (3.229).

Вычисляя энергию системы с использованием соответствующего уравнения баланса, получим:

$$U = \int_0^t f(\tau) \dot{u}_0 d\tau = A_d \omega \int_0^t f(\tau) \cos(\omega \tau) d\tau, \qquad (3.236)$$

где f — неизвестная внешняя силы, необходимая для задания перемещения частицы n = 0:

$$f(t) = m\ddot{u}_0 - K\left(u_1 - 2u_0 + u_{-1}\right) + ku_0 = A_d(k + 2K - m\omega^2)\sin(\omega t) - 2Ku_1.$$
(3.237)

Здесь использовано тождество  $u_{-1} = u_1$ . Подстановка формул (3.235), (3.237) в (3.236) дает точное выражение для энергии цепочки при кинематическом нагружении:

$$U = \frac{A_d^2}{2} (k - m\omega^2) \sin^2(\omega t) - \frac{KA_d^2}{N} \sum_{j=1}^{N-1} B_j g_j \sin \frac{\pi j}{N},$$
  

$$g_j = (\omega^2 - \omega_{\min}^2) \sin^2(\omega t) - \frac{2\omega^2(\Omega_j^2 - \omega_{\min}^2)}{\Omega_j(\Omega_j^2 - \omega^2)} h(\Omega_j),$$
  

$$h(\Omega) = \Omega - \omega \sin(\Omega t) \sin(\omega t) - \Omega \cos(\Omega t) \cos(\omega t).$$
  
(3.238)

Далее рассматривается поведение энергии длинной цепочки при кинематическом воздействии на больших временах  $(N \to \infty, t \to \infty)$ . Основной вклад в энергию в формуле (3.238) дает следующее выражение:

$$\frac{U}{A_d^2} \approx \frac{4K\omega^2}{N} \sum_{j=1}^{N-1} \frac{(1-(-1)^j)h(\Omega_j)\cos^2\frac{\pi j}{2N}(\Omega_j^2 - \omega_{\min}^2)}{\Omega_j(\Omega_j^2 - \omega^2)^2}.$$
 (3.239)

Сделаем замену индекса j = 2s + 1 и рассмотрим предел  $N \to \infty$ . Тогда формула (3.239) принимает вид:

$$U \approx \frac{8KA_d^2\omega^2}{\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{\left(\Omega^2(2p) - \omega_{\min}^2\right)\cos^2 p}{\Omega(2p)(\Omega^2(2p) - \omega^2)^2} h(\Omega(2p)) dp.$$
(3.240)

После подстановки q = 2p получим

$$U \approx \frac{mA_d^2\omega^2}{\pi} \int_0^\pi \frac{(\Omega^2 - \omega_{\min}^2)(\omega_{\max}^2 - \Omega^2)}{\Omega(\Omega^2 - \omega^2)^2} h dq.$$
(3.241)

Здесь использовано тождество  $\cos^2 \frac{q}{2} = \frac{m}{4K} (\omega_{\max}^2 - \Omega^2)$ , следующее из дисперсионного соотношения (3.212). Сделаем в интеграле (3.241) замену  $q \to \Omega$  и воспользуемся выражением для групповой скорости (3.213), тогда

$$U \approx \frac{4A_d^2 m \omega^2}{\pi a} \int_{\omega_{\min}}^{\omega_{\max}} \frac{v_g(\Omega) h \Omega}{(\Omega^2 - \omega^2)^2} d\Omega.$$
(3.242)

Основной вклад в интеграл (3.242) дает окрестность сингулярной точки  $\Omega =$ 

 $\omega.$  Введем переменную  $\epsilon=\Omega-\omega$  и воспользуемся соотношениями

$$h = 2\omega \sin^2 \frac{\epsilon t}{2} + \epsilon \left( 1 - \cos(\epsilon t) \cos^2(\omega t) + \frac{1}{2}\sin(2\omega t)\sin(\epsilon t) \right), \quad \Omega^2 - \omega^2 \approx 2\omega\epsilon.$$
(3.243)

Дальнейшие преобразования аналогичны рассмотренным в параграфе про силовое нагружение. Используя формулы (3.243) и вычисляя интеграл в (3.242), получим

$$U \approx \frac{A_d^2 m \omega^2 v_g(\omega) t}{a}.$$
 (3.244)

Формула (3.244) показывает, что энергия линейно растет во времени. Однако зависимость от групповой скорости существенно отличается от случая силового нагружения. Для кинематического нагружения скорость роста энергии пропорциональна групповой скорости. В частности, она обращается в ноль в случаях  $\omega = \omega_{\min}$  и  $\omega = \omega_{\max}$ , соответствующих нулевым групповым скоростям. Объяснение данного различия приводится в следующем параграфе.

Для оценки точности полученной асимптотической формулы (3.244) проведем сравнение с результатами численного решения уравнений движения (3.210). Зависимость скорости роста энергии (U/t) от частоты  $\omega$  при k/K = 0, 0.5, 1, 2, $t = 500/\omega_*, N = 2000, A_d/a = 1$  показана на рис. 3.26. Видно, что формула (3.244) с высокой точностью предсказывает скорость роста энергии.

#### 3.4.4 Сравнение с континуальной постановкой

В предыдущих параграфах показано, что поведение цепочки при гармоническом воздействии достаточно сложное. Сложность связана с наличием в цепочке дисперсии. В силу дисперсии приложение гармонической нагрузки вызывает возникновение волновых пакетов, состоящих из волн с разными скоростями и частотами. В настоящем параграфе дискретная цепочка с дисперсией заменяется на континуальную систему без дисперсии. В качестве континуальной системы рассматривается линейно упругий стержень постоянного сечения, совер-



Рис. 3.26: Зависимость скорости роста энергии от частоты кинематического нагружения для k/K = 0, 0.5, 1, 2. Точное решение (3.238) (сплошная линия), формула (3.244) (круги) и результаты численного решения уравнений движения (квадраты).

шающий продольные колебания. В такой системе гармоническое воздействие вызывает одиночную волну с частотой  $\omega$ . Ниже показано, что выражения для энергии стержня на больших временах аналогичны формулам (3.225), (3.244) для цепочки. В силу симметрии рассматривается полубесконечный стержень.

Рассмотрим стержень постоянного сечения с площадью сечения S, плотностью  $\rho$  и модулем Юнга E. Продольные движения такого стержня описываются уравнением

$$\ddot{u}(x,t) = v_s^2 u''(x,t), \qquad v_s^2 = \frac{E}{\rho},$$
(3.245)

где штрих обозначает производную по пространственной координате  $x \in [0; +\infty)$ . Заметим, что в данной модели фазовая и групповая скорости совпадают  $v_s = v_g$ . При кинематическом нагружении граничное условие при x = 0имеет вид:

$$u(0,t) = A_d \sin(\omega t) H(t), \qquad (3.246)$$

где Н – функция Хевисайда. Будем искать решение уравнения (3.245) в форме

гармонической волны со скоростью  $v_s$ :

$$u(x,t) = A_d \sin(\omega (t - t_s)) H (t - t_s), \qquad t_s = \frac{x}{v_s}.$$
 (3.247)

Соответствующие деформации  $\varepsilon = u'$  для  $x \neq v_s t$  вычисляются по формуле

$$\varepsilon = -\frac{A_d}{v_s}\omega\cos\left(\omega\left(t - t_s\right)\right)H\left(t - t_s\right).$$
(3.248)

Отметим, что амплитуда волны деформации обратно пропорциональна  $v_s$ .

Полная энергия стержня в момент времени t вычисляется следующим образом

$$U = \frac{\rho}{2} \int_{V} \dot{u}^{2} \mathrm{d}V + \frac{E}{2} \int_{V} \varepsilon^{2} \mathrm{d}V = ES \int_{0}^{v_{s}t} \varepsilon^{2} \mathrm{d}x, \qquad (3.249)$$

где использовано тождество  $\dot{u} = -v_s u'$ . Подставляя выражение для деформации (3.248) в формулу (3.249) и интегрируя, получим:

$$U = \frac{ESA_d^2\omega^2}{2v_s} \left(t + \frac{\sin(2\omega t)}{2\omega}\right).$$
(3.250)

На больших временах осциллирующее слагаемое в формуле (3.250) может быть отброшено:

$$U \approx \frac{1}{2} \rho S A_d^2 \omega^2 v_s t. \tag{3.251}$$

Видно, что энергия стержня линейно растет во времени. Скорость роста пропорциональна скорости звука  $v_s$ . Отметим, что формула (3.251) совпадет с асимптотической формулой (3.244) для цепочки, если  $v_s = v_g$  и сделать замену

$$\rho S \to m/a.$$
 (3.252)

Рассмотрим теперь силовое нагружение. В таком случае уравнение движе-

ния стержня удобнее записать в деформациях:

$$\ddot{\varepsilon} = v_s^2 \varepsilon''. \tag{3.253}$$

Пусть стержень подвержен действию внезапно приложенной в точке x = 0силы  $f = \frac{A_f}{2} \sin(\omega t) H(t)$ . Соответствующее граничное условие имеет вид:

$$\varepsilon(0,t) = \frac{A_f}{2ES}\sin(\omega t)H(t). \qquad (3.254)$$

Будем искать решение в виде гармонической волны, распространяющейся со скоростью  $v_s$  и удовлетворяющей граничному условию (3.254):

$$\varepsilon(x,t) = \frac{A_f}{2\rho S v_s^2} \sin\left(\omega \left(t - t_s\right)\right) H\left(t - t_s\right), \qquad t_s = \frac{x}{v_s}.$$
(3.255)

Отметим, что амплитуда волны деформации в данном случае пропорциональна квадрату скорости звука  $v_s$ . Подставляя деформации (3.255) в выражение для энергии (3.249), получим:

$$U = \frac{A_f^2}{8\rho S v_s} \left( t - \frac{\sin(2\omega t)}{2\omega} \right). \tag{3.256}$$

В силу симметрии энергия бесконечного стержня в два раза больше энергии полубесконечного стержня (3.256). Домножая формулу (3.256) на 2 и пренебрегая ограниченным слагаемым, получим:

$$U \approx \frac{A_f^2 t}{4\rho S v_s}.\tag{3.257}$$

Видно, что энергия обратно пропорциональна скорости звука  $v_s$ . Формула (3.257) аналогична асимптотическому выражению (3.225) для цепочки при условии, что сделана замена (3.252).

Таким образом, выражения для энергии стержня (формулы (3.251) и

(3.257)) при кинематическом нагружении и силовом нагружении идентичны асимптотическим формулам (3.225), (3.244) для цепочки при условии, что скорость звука и плотность стержня подобраны правильным образом (см. формулу (3.252)).

Решение континуальной задачи дает простое объяснение различию в зависимости энергии при двух типах нагружения от скорости волн. В обоих случаях возбуждается одиночная волна деформации с частотой  $\omega$ , распространяющаяся со скоростью  $v_s$ . Однако амплитуда данной волны зависит от вида нагружения. При кинематическом нагружении амплитуда пропорциональна  $1/v_s$  (см. формулу (3.248)), в то время как при силовом нагружении амплитуда пропорциональна  $1/v_s^2$  (см. формулу (3.255)). В результате зависимость энергии от скорости оказывается различной.

В заключение отметим, что рассмотренная континуальная модель неприменима при  $v_s = v_g = 0$ . Следовательно, скорость подвода энергии при  $\omega = \omega_{\min} \neq 0$  и  $\omega = \omega_{\max}$  не может быть вычислена в рамках данной модели. В данных случаях необходимо использовать формулы (3.226).

#### 3.4.5 Результаты параграфа 3.4

В настоящем параграфе рассмотрен ряд задач о подводе энергии в цепочку на упругом основании при кинематическом и силовом гармоническом воздействии. Получены точные и асимптотические формулы для полной энергии цепочки. Показано, что для частот возбуждения, лежащих внутри спектра цепочки, энергия системы линейно растет. Скорость роста энергии зависит от групповой скорости, соответствующей частоте внешнего воздействия. Для ненулевых групповых скоростей энергия линейно растет во времени. В случае, если групповая скорость обращается в ноль, поведение системы при кинематическом и силовом нагружении качественно отличается. При кинематическом — энергия ограничена, а при силовом — растет как  $t^{3/2}$ . Аналогичная задача решена для континуального стержня без дисперсии. Сравнение дискретной и континуальной моделей позволило сформулировать простой способ оценки энергии при гармоническом воздействии. Подвод энергии происходит таким образом, как будто возбуждается одна волна, имеющая частоту внешнего воздействия и распространяющаяся с групповой скоростью, соответствующей данной частоте. Представленные результаты могут быть распространены на случай произвольного периодического воздействия. Для этого достаточно разложить внешнюю силу в ряд Фурье, для каждой гармоники применить полученные выше формулы и воспользоваться принципом суперпозиции.

#### 3.5 Заключение к главе 3

В настоящей главе развит подход к описанию баллистического (волнового) переноса энергии в упругих твердых телах с кристаллической структурой. С использованием данного подхода получены точные и приближенные формулы, описывающие изменение начального распределения кинетической энергии в решетке во времени, связанные с баллистическим переносом энергии. Подход применен к двум классам решеток.

В параграфе 3.2 рассмотрены скалярные решетки, имеющие одну степень свободы на элементарную ячейку. Для таких решеток применен подход, использующий в качестве основных переменных ковариации скоростей частиц. Выведены точные и приближенные дифференциально-разностные уравнения, описывающие динамику ковариаций. Получены решения данных уравнений, позволяющие, в частности, вычислить поле кинетической энергии в решетке в данный момент времени. С использованием разработанного подхода решен ряд задач о переносе энергии в квадратной решетке, совершающей поперечные колебания. В частности, решены задачи о ступенчатом, круговом и синусоидальном распределении начальной кинетической энергии. Показано, что полученные аналитические решения с высокой точностью описывают результаты численного решения уравнений динамики решетки.

В параграфе 3.3 проведено обобщение подхода на случай сложных гармонических решеток. Получено точное решение уравнений движения частиц решетки. С использованием точного решения выведены точная и приближенная формулы для матрицы, состоящей из кинетических энергий, соответствующих степеням свободы элементарной ячейки. В частном случае скалярной решетки приближенная формула совпадает с аналогичным результатом, полученным в предыдущей главе на основе ковариационного подхода. С использованием приближенной формулы получены решения задач с точечным, ступенчатым и синусоидальным распределениями начальной кинетической энергии. Данные решения подходят для широкого класса сложных решеток с взаимодействием произвольного числа соседей. В частности, данные решения применены для описания переноса энергии в одномерной цепочке с чередующимися массами и двумерной решетке графена, совершающей поперечные колебания. Показано, в частности, что в процессе переноса кинетические энергии частиц элементарной ячейки, имеющих разные массы, заметно отличаются. Для решетки графена показано, что несмотря на изотропию упругих свойств, перенос энергии в ней существенно анизотропен. Полученные аналитические решения с высокой точностью описывают результаты численного решения уравнений динамики решетки. Отметим, что полученные в данной главе формулы (например, формулы (3.124), (3.135)) показывают, что для описания баллистического переноса энергии тепла требуется знание полного дисперсионного соотношения и соответствующих групповых скоростей. Изложенная в данной главе теория может использоваться для постановки и интерпретации экспериментов по изучению баллистического распространения тепла. В частности, полученное аналитическое решение задачи о затухании синусоидального теплового профиля может использоваться на практике для интерпретации экспериментальных данных, получаемых методом, который в англоязычной литературе называется "transient thermal grating" [80, 87, 174].

В параграфе 3.4 на примере одномерной цепочки на упругом основании рассмотрен вопрос о поводе энергии при кинематическом и силовом воздействии. Получены точные решения уравнений динамики, на основе которых определены зависимости полной энергии системы от времени. Показано, что энергия системы растет только в том случае, если частота внешнего воздействия находится внутри спектра собственных частот цепочки. С использованием асимптотических методов получены простые приближенные формулы, описывающие рост энергии системы на больших временах. Проведено сравнение с аналогичной континуальной задачей о стержне, подверженном гармоническому воздействию. Показано, что в случае, если частота внешнего воздействия не принадлежит границам спектра, дискретное и континуальное решения дают близкие результаты. Если частота внешнего воздействия совпадает с максимальной или минимальной собственной частотой системы, то полученное континуальное решение неприменимо и должно использоваться решение дискретной задачи. В частности, показано, что в этом случае энергия системы растет во времени нелинейно. Результаты, полученные в данной главе, опубликованы в работах [109, 110, 181, 117].

# Глава 4

# Термоупругие эффекты в кристаллических твердых телах

# 4.1 Обзор литературы по моделированию термомеханических процессов

В предыдущих главах в основном рассматривались кристаллические твердые тела с линейными взаимодействиями между частицами. Геометрическая нелинейность колебаний частиц также не учитывалась. Рассмотренные линейные модели позволяют аналитически описывать упругость, переходные тепловые процессы и перенос тепловой энергии (теплопроводность) в кристаллических телах. Однако они непригодны для описания термоупругих эффектов, таких как тепловое расширение или переход механической энергии в тепловую. Поэтому в данной главе рассматривается физическая и геометрическая нелинейность колебаний частиц деформируемого твердого тела.

В параграфе 4.2 рассматриваются одномерные цепочки с парными силовыми взаимодействиями. С использованием подхода, предложенного в работе [239], проводится континуализация уравнений динамики и уравнения баланса энергии. В результате получаются уравнения связанной термоупругости для цепочки. В качестве примера рассматривается известная модель Ферми-Паста-Улама ( $\alpha$ -ФПУ) [48] — одномерная цепочка с квадратичной нелинейностью. Данная модель позволяет качественно описать все перечисленные выше термомеханические процессы. Несмотря на кажущуюся простоту модели, аналитическое описание происходящих в ней макроскопических термоупругих процессов, теплопроводности и перехода механической энергии в тепловую представляется весьма сложной, до конца не решенной задачей. Цепочка ФПУ демонстрирует аномальные термомеханические свойства. В работах [28, 29, 209, 61, 217] показано, что теплопроводность в ФПУ цепочке не описывается ни законом Фурье, ни уравнением Максвелла-Каттанео. В предельном случае больших времен и бесконечно длинной цепочки теплопроводность описывается уравнением с дробными производными [148]. Однако данная модель не описывает квазибаллистический перенос тепла, характерный для малых времен и цепочек конечной длины. Поэтому далее в настоящей главе для описания квазибаллистического режима теплопроводности используются результаты, полученные в главе 3.

Еще более сложную проблему представляет описание перехода механической энергии в тепловую. Данный процесс отвечает, в частности, за затухание макроскопических механических колебаний цепочки. Исследование процесса затухания механических колебаний ФПУ цепочки имеет долгую историю, начиная с пионерской работы Ферми, Паста и Улама [48]. В работе [48] рассматривались начальные условия, соответствующие возбуждению первой собственной формы цепочки. Численно было показано, что затухание колебаний происходит немонотонно: процессы затухания и роста энергии механических колебаний чередуются. В литературе данный эффект часто называется парадоксом возвращения ("Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou recurrence paradox", см. например, [56]). Обзор работ, направленных на объяснение данного парадокса, приведен, например, в работах [56, 14, 164]. Отметим, что в постановке, предложенной в оригинальной работе [48], колебания рассматривались при нулевой начальной температуре. В параграфе 4.2 будет показано, что добавление конечной температуры (случайных скоростей частиц) позволяет обеспечить монотонное затухание механической энергии и, следовательно, устранить парадокс.

В параграфе 4.3 исследуется тепловое расширение двумерных и трехмерных плотноупакованных решеток с парными силовыми взаимодействиями. Выводится связь коэффициента теплового расширения решетки с параметрами межчастичных взаимодействий. Определяются условия, при которых решетка демонстрирует отрицательное тепловое расширение.

В параграфе 4.4 рассматривается квазиодномерная цепочка, частицы которой могут совершать продольные и поперечные колебания в плоскости. В отличие от одномерной цепочки, в квазиодномерной присутствует два типа нелинейности — геометрическая и физическая. Данная модель позволяет описать, в частности, отрицательное тепловое расширение. Таким свойством обладает довольно широкий класс реальных материалов. Например, лед имеет отрицательный коэффициент теплового расширения при низких температурах [176]. Другой известный материал с отрицательным тепловым расширением — графен [216, 218]. В обзорных работах [43, 8, 152, 138] приведен обширный список натуральных и синтетических материалов с отрицательным коэффициентом теплового расширения. Данные материалы имеют большой потенциал практического применения, поэтому важно исследовать физические механизмы, приводящие к отрицательному тепловому расширению. К таким механизмам относятся, например, колебания атомов в направлении, перпендикулярном связи [138, 190, 191, 44] и твердотельные вращения групп атомов (rigid-unit modes) [152, 194, 71, 65]. Интуитивно данные механизмы хорошо понятны. Однако вопрос о влиянии структуры решетки и взаимодействий между частицами на коэффициент теплового расширения остается открытым. Ответ на данный вопрос часто получается с использованием подходов статистической физики [77]. Теоретически, термодинамические свойства кристалла могут быть рассчитаны с использованием статистической суммы. Однако ее вычисление сводится к работе с интегралом по многомерному фазавому пространству. Данный интеграл берется, как правило, только в квази-гармоническом приближении [129] или в случае простых одномерных моделей [127]. Во многих случаях квазигармоническое приближение оказывается недостаточным. В частности, оно не позволяет описать зависимость коэффициента теплового расширения от температуры. Учет нелинейных эффектов в рамках подходов статистической физики для нескольких систем приведен, например, в работах [96, 44, 66]. Однако в целом вопрос об учете нелинейных эффектов остается открытым. Поэтому в параграфе 4.4 развивается альтернативный подход, основанный на разложении тензора напряжений и тепловой энергии в ряд по малому параметру, характеризующему тепловое движение [101, 243]. Подход используется для вывода определяющих уравнений, описывающих линейное и нелинейное тепловое расширение квазиодномерной цепочки. Определяются условия, при которых цепочка демонстрирует положительное и отрицательное тепловое расширение. В качестве примера рассматривается цепочка Леннарда-Джонса, для которой проводится сравнение аналитических результатов с численным решением уравнений движения. Основные результаты, полученные в главе, опубликованы в работах [108, 111, 112, 105, 119].

# 4.2 Линейная термоупругость цепочки с учетом баллистического теплопереноса

#### 4.2.1 Континуализация уравнений динамики

В настоящем параграфе проводится континуализация уравнений динамики одномерной нелинейной цепочки с взаимодействиями ближайших соседей. Для этого используется подход, изложенный в работе [239]. Уравнения движения частицы *п* имеют вид:

$$m\dot{v}_n = F_n - F_{n-1}, \qquad F_n = \Pi'(a + \epsilon_n), \qquad \epsilon_n = u_{n+1} - u_n,$$
(4.1)

где  $u_n, v_n$  — перемещение и скорость частицы n. К уравнениям (4.1) формулируются следующие начальные условия:

$$u_n = u_n^0, \qquad v_n = v_n^0,$$
 (4.2)

где  $u_n^0$  и  $v_n^0$  — некоррелированные случайные величины. В предыдущих главах предполагалось, что математические ожидания  $u_n^0, v_n^0$  равны нулю. В настоящей главе такое предположение не делается.

Движения частиц разделяются на механические и тепловые [105]. По определению механическими называются движения, связанные с изменением математического ожидания перемещений частиц. Макроскопическое поле перемещений u(x,t), соответствующее механическому движению, определяется формулой:

$$u(na,t) = \left\langle u_n \right\rangle,\tag{4.3}$$

где a — постоянная решетки,  $\langle ... \rangle$  — математическое ожидание (при моделировании заменяется на среднее по реализациям). Тепловое движение определяется как разница между полным перемещением частицы и механическим перемещением. Тепловые перемещения,  $\tilde{u}_n$ , вычисляются так:

$$\tilde{u}_n = u_n - \left\langle u_n \right\rangle. \tag{4.4}$$

Отметим, что в отличие от механических перемещений тепловые перемещения являются случайными величинами. Аналогичное разделение осуществляется для скоростей частиц и других величин.

Далее рассматривается континуальное описание механических движений це-

почки. Для этого вычисляется математическое ожидание от обеих частей уравнения (4.1):

$$m \left\langle v_n \right\rangle = \left\langle F_n - F_{n-1} \right\rangle. \tag{4.5}$$

Сопоставим цепочке эквивалентную сплошную среду, положения точек которой в деформированном состоянии определяются следующим образом:

$$r_n = na + \left\langle u_n \right\rangle. \tag{4.6}$$

Введем непрерывные функции u и  $\sigma$  такие, что:

$$v(r_n) = \left\langle v_n \right\rangle, \qquad \sigma(r_n) = \left\langle F_n \right\rangle = \left\langle \Pi'(a + \epsilon_n) \right\rangle.$$
 (4.7)

Предположим, что они медленно меняются на расстояниях порядка *a*, тогда уравнение динамики (4.5) принимает вид:

$$m\dot{v}(r_n) = \sigma(r_n) - \sigma(r_{n-1}) \approx \left(r_n - r_{n-1}\right) \frac{\partial\sigma}{\partial x} = \left(a + \left\langle\epsilon_{n-1}\right\rangle\right) \frac{\partial\sigma}{\partial x} \approx \left(a + \left\langle\epsilon_n\right\rangle\right) \frac{\partial\sigma}{\partial x}.$$
(4.8)

Здесь производная по *x* вычисляется в точке  $r_n$ . В результате получаем уравнение, описывающее динамику цепочки в континуальном приближении:

$$\rho \dot{v} = \frac{\partial \sigma}{\partial x}, \qquad \rho(r_n) = \frac{m}{V(r_n)}, \qquad V(r_n) = a + \left\langle \epsilon_n \right\rangle.$$
(4.9)

Данное уравнение совпадает с уравнением одномерной сплошной среды. Макроскопические плотность и напряжения в этой эквивалентной сплошной среде определяются формулами (4.7), (4.9).

#### 4.2.2 Континуализация уравнения баланса энергии

В настоящем параграфе проводится континуализация уравнения баланса энергии для цепочки. Данная процедура, предложенная в работе [239], позволяет получить выражения, связывающие тепловой поток в цепочке и тепловую энергию с микропараметрами.

Рассмотрим уравнение баланса энергии для частицы *n*. Полная энергия  $E_n$  частицы *n* имеет вид:

$$E_n = \frac{1}{2}mv_n^2 + \frac{1}{2}\left(\Pi_n + \Pi_{n-1}\right).$$
(4.10)

Вычислим математическое ожидание от производной полной энергии частицы по времени:

$$\left\langle E_n \right\rangle = \frac{1}{2} \left\langle F_n \left( v_{n+1} + v_n \right) \right\rangle + \frac{1}{2} \left\langle F_{n-1} \left( v_n + v_{n-1} \right) \right\rangle.$$
 (4.11)

Проведем континуализацию в правой части формулы (4.11):

$$\left\langle E_n \right\rangle \approx \frac{V}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left\langle F_n \left( v_{n+1} + v_n \right) \right\rangle.$$
 (4.12)

Введем плотность внутренней энергии системы U:

$$\left\langle E_n \right\rangle = \frac{m}{2} \left\langle v_n \right\rangle^2 + U, \quad U = m\mathcal{U} = \frac{m}{2} \left\langle \tilde{v}_n^2 \right\rangle + \left\langle \Pi(a + \epsilon_n) \right\rangle.$$
 (4.13)

Тогда уравнение (4.12) принимает вид:

$$\rho\left(\left\langle v_n\right\rangle^2 + \mathcal{U}\right) = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{2}\left\langle F_n\left(v_{n+1} + v_n\right)\right\rangle\right). \tag{4.14}$$

Воспользуемся соотношениями:

$$\frac{1}{2} \Big\langle F_n \left( v_{n+1} + v_n \right) \Big\rangle \approx \sigma \Big\langle v_n \Big\rangle + \frac{1}{2} \Big\langle \tilde{F}_n \left( \tilde{v}_{n+1} + \tilde{v}_n \right) \Big\rangle, \qquad \rho \Big\langle \dot{v}_n \Big\rangle \Big\langle v_n \Big\rangle = \frac{\partial \sigma}{\partial x} \Big\langle v_n \Big\rangle.$$
(4.15)

Подстановка данных соотношений в формулу (4.14) дает макроскопическое континуальное уравнение баланса энергии:

$$\rho \dot{\mathcal{U}} = \sigma \dot{\varepsilon} - \frac{\partial h}{\partial x}, \qquad h = -\frac{1}{2} \Big\langle F_n \left( v_{n+1} + v_n \right) \Big\rangle. \tag{4.16}$$

Формула (4.16) связывает тепловой поток в цепочке с силами взаимодействия и тепловыми перемещениями частиц.

## 4.2.3 Определяющие соотношения Грюнайзена и Дюамеля-Неймана

Система уравнений баланса (4.9), (4.16) не замкнута. Для замыкания необходимы определяющие соотношения для напряжений  $\sigma$  и теплового потока h. В настоящем параграфе выводятся определяющие соотношения для напряжений в форме Ми-Грюнайзена и Дюамеля-Неймана. Для вывода используется подход, предложенный в работе [101].

Основная идея вывода состоит в том, что напряжения зависят от двух независимых малых величин:  $\langle \epsilon_n \rangle$  и  $\tilde{\epsilon}_n$ . Разложение напряжений в ряд по данным величинам позволяет получать определяющие соотношения. Также вводится разделение напряжений на холодную и тепловую составляющие:

$$\sigma = \left\langle \Pi' \left( V + \tilde{\epsilon}_n \right) \right\rangle = \sigma_0 + \sigma_T, \qquad \sigma_0 = \Pi' \left( V \right), \qquad \sigma_T = \sigma - \sigma_0. \tag{4.17}$$

Раскладывая выражение для  $\sigma_T$  в ряд Тейлора по параметру  $\tilde{\epsilon}_n$  и сохраняя

слагаемые до второго порядка, получим:

$$\sigma_T \approx \frac{1}{2} \Pi'''(V) \Big\langle \tilde{\epsilon}_n^2 \Big\rangle. \tag{4.18}$$

Проведем разделение внутренней энергии на холодную и тепловую составляющие:

$$U = U_0 + U_T, \qquad U_T = U - U_0, \qquad U_0 = \Pi(V).$$
 (4.19)

Раскладывая  $U_T$  в ряд по параметру  $\tilde{\epsilon}_n$  и сохраняя слагаемые второго порядка, получим:

$$U_T \approx \frac{m}{2} \left\langle \tilde{v}_n^2 \right\rangle + \frac{1}{2} \Pi''(V) \left\langle \tilde{\epsilon}_n^2 \right\rangle.$$
(4.20)

Из формул (4.18), (4.20) видно, что тепловые напряжения зависят от тепловых деформаций связей, а тепловая энергия — от деформаций и скоростей. Поэтому необходимо дополнительное соотношение, связывающее деформации и скорости. В качестве такого дополнительного соотношения используется равенство кинетической и потенциальной составляющих внутренней энергии (в главе 2 данный факт демонстрировался в гармоническом приближении). Тогда формула (4.20) для тепловой энергии принимает вид:

$$U_T \approx \Pi''(V) \left\langle \tilde{\epsilon}_n^2 \right\rangle.$$
 (4.21)

Отметим, что равенство потенциальной и кинетической составляющих тепловой энергии выполняется только в первом приближении по тепловому параметру  $\epsilon_n$ . Следующие приближения рассматриваются в работах [101, 239].

Исключая параметр  $\left< \tilde{\epsilon}_n^2 \right>$  из формул (4.18), (4.21) для напряжений и тепловой энергии, получим уравнение состояния в форме Ми-Грюнайзена:

$$\sigma_0 = \Pi'(V), \qquad \sigma_T = -\frac{\Gamma(V)}{V} U_T, \qquad \Gamma = -\frac{V \Pi'''(V)}{2\Pi''(V)}, \qquad (4.22)$$

где Г — коэффициент Грюнайзена. Данное выражение для коэффициента Грю-

найзена, полученное в работе [101], совпадает с аналогичным выражением, полученным с использованием методов статистической физики в работе [36].

Покажем теперь, что в случае малых деформаций и температур определяющее уравнение (4.22) принимает форму уравнения Дюамеля-Неймана [255]. Используя определение кинетической температуры и равенство кинетической и потенциальной составляющих тепловой энергии, получим:

$$k_B T = m \left\langle \tilde{v}_n^2 \right\rangle, \qquad \mathcal{U}_T = c_V T, \qquad c_V = \frac{k_B}{m}.$$
 (4.23)

Выражение (4.9) для объема V представим в виде:

$$V = a + \left\langle u_{n+1} - u_n \right\rangle \approx a(1+\varepsilon), \qquad \varepsilon = \frac{\partial u}{\partial x}.$$
 (4.24)

Рассмотрим случай малых деформаций  $|\varepsilon| \ll 1$  и положим  $\Pi'(a) = 0$ . Тогда раскладывая выражения для холодной и тепловой составляющих напряжений (4.22) в ряд по  $\varepsilon$  и используя (4.23), получим:

$$\sigma_0 = E\varepsilon, \qquad E = \Pi''(a) a, \qquad \sigma_T = -\Gamma(a)\rho c_V T. \tag{4.25}$$

Данные формулы можно переписать в виде определяющего соотношения Дюамеля-Неймана:

$$\sigma = E\left(\varepsilon - \beta T\right), \qquad \beta = \frac{\Gamma(a)c_V\rho}{E}, \qquad (4.26)$$

где  $\beta$  — коэффициент теплового расширения.

Таким образом, для цепочки получены макроскопические определяющие уравнения в форме Ми-Грюнайзена (4.22) и Дюамеля-Неймана (4.26).

## 4.2.4 Уравнения связанной линейной термоупругости цепочки

В настоящем параграфе с использованием полученных выше уравнений баланса и определяющих соотношений получается система уравнений связанной термоупругости для цепочки.

Рассмотрим систему уравнений баланса, описывающую поведение цепочки в континуальном пределе:

$$\rho \dot{v} = \frac{\partial \sigma}{\partial x}, \qquad \rho \dot{\mathcal{U}} = \sigma \dot{\varepsilon} - \frac{\partial h}{\partial x}, \quad \varepsilon = \frac{\partial u}{\partial x}.$$
 (4.27)

Разделяя напряжения и внутреннюю энергию на холодную и тепловую составляющие, получим:

$$\rho \dot{v} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \sigma_0 + \sigma_T \right), \qquad \rho \left( \dot{\mathcal{U}}_0 + \dot{\mathcal{U}}_T \right) = \left( \sigma_0 + \sigma_T \right) \dot{\varepsilon} - \frac{\partial h}{\partial x}. \tag{4.28}$$

Воспользуемся соотношением  $\rho \dot{\mathcal{U}}_0 = \sigma_0 \dot{\varepsilon}$ , тогда формула (4.28) принимает вид:

$$\rho \dot{v} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \sigma_0 + \sigma_T \right), \qquad \rho \dot{\mathcal{U}}_T = \sigma_T \dot{\varepsilon} - \frac{\partial h}{\partial x}. \tag{4.29}$$

Добавим к системе (4.29) линейные определяющие соотношения, полученные выше:

$$\mathcal{U}_T = c_V T, \qquad \sigma_0 = E\varepsilon, \qquad \sigma_T = -\beta ET$$

$$(4.30)$$

Подстановка данных соотношений в формулу (4.29) дает:

$$\rho_0 \dot{v} = E \frac{\partial}{\partial x} \left( \varepsilon - \beta T \right), \qquad \rho c_V \dot{T} = -\beta E T \dot{\varepsilon} - \frac{\partial h}{\partial x}. \tag{4.31}$$

Полученная система уравнений (4.31) описывает термоупругое поведение цепочки. Данная система уравнений не замкнута, для замыкания необходимо определяющее соотношение, связывающее тепловой поток с температурой. Вывод такого определяющего соотношения выходит за рамки данной работы.

Сравним систему (4.31) с классической системой уравнений связанной линейной термоупругости [255]:

$$\rho \dot{v} = E \frac{\partial}{\partial x} \left( \varepsilon - \beta T \right), \qquad \rho c_V \dot{T} = -\beta E T_0 \dot{\varepsilon} - \frac{\partial h}{\partial x}. \tag{4.32}$$

Здесь  $T_0$  — температура естественного состояния тела. Под естественным понимается состояние, в котором при  $\varepsilon = 0$  напряжения отсутствуют [255]. В цепочке напряжения при  $\varepsilon = 0$  отсутствуют только при T = 0, поэтому первые слагаемые в правых частях уравнений (4.31), (4.32) отличаются.

Для замыкания уравнений (4.31) (или (4.32)) необходимо определяющее соотношение для теплового потока *h*. Как уже отмечалось ранее, получить такое определяющее соотношение для нелинейных цепочек пока не удается. Поэтому далее для описания динамики цепочки в континуальном приближении будет использоваться первое из уравнений (4.31), а для расчета поля температуры формулы, полученные в главе 3 в гармоническом приближении.

#### 4.2.5 О свободной энергии цепочки

В настоящем параграфе обсуждаются выражения для свободной энергии Гельмгольца, соответствующие уравнениями классической термоупругости (4.32) и термоупругости цепочки (4.31).

Рассмотрим сначала свободную энергию Гельмгольца, соответствующую уравнению (4.32). Запишем континуальные уравнения баланса для одномерного случая при отсутствии объемных источников тепла и внешних сил:

$$\rho \dot{v} = \frac{\partial \sigma}{\partial x}, \qquad \rho \dot{\mathcal{U}} = \sigma \dot{\varepsilon} + T \dot{S}, \qquad T \dot{S} = -\frac{\partial h}{\partial x},$$
(4.33)

где S — энтропия. Воспользуемся известной связью напряжений и энтропии со

свободной энергией Гельмгольца f:

$$\sigma = \frac{\partial f}{\partial \varepsilon}, \qquad S = -\frac{\partial f}{\partial T}.$$
(4.34)

Пусть свободная энергия имеет вид [255]:

$$f = \frac{1}{2}E\varepsilon^2 - E\beta\varepsilon(T - T_0) - \frac{\rho c_V}{T_0}(T - T_0)^2.$$
 (4.35)

Подставляя свободную энергию (4.35) в формулы (4.34), получим выражения для напряжений и энтропии:

$$\sigma = E\left(\varepsilon - \beta(T - T_0)\right), \qquad S = E\beta\varepsilon + \frac{\rho c_V}{T_0}(T - T_0). \tag{4.36}$$

Подставляя данные выражения в первое и последнее их уравнений (4.33), получим:

$$\rho \dot{v} = E \frac{\partial}{\partial x} \left( \varepsilon - \beta T \right), \qquad \rho c_V \frac{T}{T_0} \dot{T} + E \beta T \dot{\varepsilon} = -\frac{\partial h}{\partial x}. \tag{4.37}$$

Линеаризация формулы (4.37) при температурах, близких к  $T_0$ , и малых  $\varepsilon$  дает уравнения классической термоупругости (4.32).

Рассмотрим теперь термоупругость цепочки. Покажем, что свободная энергия Гельмгольца для цепочки имеет вид:

$$f = \frac{1}{2}E\varepsilon^2 - E\beta\varepsilon T - \rho c_V T\left(\ln\frac{T}{T_*} - 1\right), \qquad (4.38)$$

где  $T_*$  — константа, имеющая размерность температуры. Подставляя свободную энергию (4.38) в формулы (4.34), получим выражения для напряжений и энтропии:

$$\sigma = E(\varepsilon - \beta T), \qquad S = E\alpha\varepsilon + \rho c_V \ln \frac{T}{T_*}.$$
(4.39)

Подставляя данные формулы в первое и последнее из уравнений (4.33), получим уравнения термоупругости цепочки (4.31).

Таким образом, свободная энергия Гельмгольца для цепочки определяется формулой (4.38). Данная формула, вообще говоря, не совпадает с выражением для свободной энергии, используемым в классической линейной теории упругости [255]. Отметим также, что энтропия цепочки может быть расчитана по формуле (4.39). Более подробно вопрос об изменении энтропии в цепочке в процессе теплопроводности рассматривается в работах [104, 223].

### 4.2.6 О задаче с периодическим распределением температуры

В настоящем параграфе рассматривается вопрос об описании перехода механической энергии в тепловую в периодической задаче термоупругости.

Пусть ячейка периодичности имеет длину *L*, тогда температура, тепловой поток, перемещение и скорость являются периодическими функциями:

$$T(x) = T(x+L), \qquad h(x) = h(x+L), \qquad u(x) = u(x+L), \qquad v(x) = v(x+L).$$
(4.40)

В случае классической термоупругости уравнение баланса энергии имеет вид (4.32). Проинтегрируем обе части данного уравнения по периоду (по *x* от 0 до *L*) и воспользуемся соотношениями:

$$\int_{0}^{L} \frac{\partial h}{\partial x} dx = h(L) - h(0) = 0,$$

$$\int_{0}^{L} T_{0} \dot{\varepsilon} dx = T_{0} \int_{0}^{L} \frac{\partial v}{\partial x} dx = T_{0} \Big( v(L) - v(0) \Big) = 0.$$
(4.41)

Здесь использованы условия периодичности (4.40). В результате получаем:

$$\rho c_V \dot{T}_{av} = 0, \qquad T_{av} = \frac{1}{L} \int_0^L T dx.$$
(4.42)

Видно, что в рассматриваемом случае средняя по периоду температура не зави-

сит от времени. Следовательно, тепловая энергия системы не растет. Отметим, что данный факт не зависит от формы определяющего соотношения для теплового потока.

Рассмотрим теперь макроскопическую термоупругость цепочки, описываемую системой уравнений (4.31). Проводя аналогичные преобразования, получим:

$$\rho c_V \dot{T}_{av} = -\frac{E\beta}{L} \int_0^L T \dot{\varepsilon} dx = -\frac{E\beta}{L} \int_0^L (T - T_{av}) \dot{\varepsilon} dx.$$
(4.43)

В рассматриваемом случае средняя температура, вообще говоря, может меняться во времени, однако это нелинейный эффект. В отличие от предыдущего пункта поведение средней температуры может зависеть от закона теплопроводности (определяющего соотношения для *h*).

Таким образом, уравнения связанной термоупругости (4.31), (4.32) в линейном приближении не описывают изменение средней температуры в цепочке, происходящее за счет перехода механической энергии в тепловую. Поэтому далее данный процесс исследуется численно (см. параграф 4.2.10).

#### 4.2.7 Пример. Цепочка Ферми-Паста-Улама (ФПУ)

В настоящем параграфе и далее рассматривается макроскопическая термоупругость цепочки α-ΦПУ [48] с периодическим распределением температуры.

Цепочка состоит из N одинаковых частиц массы m, соединенных нелинейными пружинками. Уравнение движения частицы n цепочки имеет вид:

$$m\dot{v}_n = C(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) + \alpha \Big( (u_{n+1} - u_n)^2 - (u_n - u_{n-1})^2 \Big), \qquad (4.44)$$

где  $u_n, v_n$  — перемещение и скорость частицы, 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, нулевым тепловым потокам и отсутствию механических движений. Начальные скорости и перемещения частиц имеют вид:

$$u_n = 0, \quad v_n = \xi_n \sqrt{\frac{2k_B}{m} \left( T_b + \Delta T \sin \frac{2\pi n}{N} \right)}, \quad \left\langle \xi_n \right\rangle = 0, \quad \left\langle \xi_n \xi_m \right\rangle = \delta_{nm}, \tag{4.45}$$

где  $\xi_n$  — некоррелированные случайные числа с нулевым математическим ожиданием и единичной дисперсией;  $T_b$  — средняя (фоновая) температура;  $\Delta T$  амплитуда начальной температуры. Отметим, что в экспериментах похожие начальные условия реализуются при использовании метода transient thermal grating [87, 174, 80].

Теплопроводность в αβ-ФПУ и β-ФПУ цепочках с начальными условиями (4.45) численно исследовалась в работах [61, 217]. Однако в данных работах не рассматривались термоупругие эффекты.

Отметим, что начальные условия, использованные в оригинальной работе Ферми-Паста-Улама [48], существенно отличаются от начальных условий (4.45). В работе [48] рассматривались детерминированные начальные условия, соответствующие возбуждению первой собственной формы механических колебаний при нулевой температуре. Напротив, начальные условия (4.45) — стохастические и соответствуют конечной температуре.

#### 4.2.8 Баллистический резонанс в цепочке ФПУ

В настоящем параграфе рассматривается макроскопическая термоупругость α-ΦΠУ цепочки (4.44) с начальными условиями (4.45). Демонстрируется резонансное явление, возникающее за счет баллистического характера переноса тепловой энергии.

Для описания макроскопических механических движений цепочки используется полученное выше уравнение линейной термоупругости (первое из уравнений (4.31)). Данное уравнение не замкнуто, т.к. оно содержит температуру. Для вычисления температуры используется формула, полученная в главе 3. При этом не учитывается перекачка механической энергии в тепловую. В результате макроскопическое поведение цепочки описывается уравнениями:

$$\ddot{u} = c_s^2 \Big( u'' - \beta T' \Big), \qquad T = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} T_0(x + v_g(p)t) dp.$$
(4.46)

Здесь u(x,t) — поле перемещений; T(x,t) — поле температуры;  $T_0(x)$  — начальное поле температуры; штрих обозначает производную по пространству;  $v_g$  — групповая скорость для цепочки;  $c_s = \sqrt{E/\rho}$  — скорость звука; E — модуль Юнга;  $\rho$  — погонная плотность;  $\beta$  — коэффициент теплового расширения. Связь микро- и макропараметров модели определена формулами (4.55) и (4.56).

Отметим, что второе из уравнений (4.46) было выведено в главе 3 в предположении, что взаимодействия в цепочке — линейные. Следовательно, данное уравнение описывает чисто баллистический режим распространения тепла. Однако далее будет показано, что оно описывает эволюцию температуры с приемлемой точностью (см. рис. 4.1).

В континуальной постановке используются периодические граничные условия и следующие начальные условия, соответствующие начальным условиям (4.45):

$$T_0 = 2(T_b + \Delta T \sin(\lambda x)), \qquad u = 0, \qquad v = 0,$$
 (4.47)

где  $\lambda = 2\pi/L$ , L — длина цепочки. Подставляя начальное распределение температуры (4.47) во вторую из формул (4.46), получим:

$$T = T_b + A(t)\sin(\lambda x), \qquad A(t) = \Delta T J_0(\omega t), \qquad (4.48)$$

где  $\omega = \lambda c_s$ ,  $J_0 - функция Бесселя первого рода. Формула (4.48) показывает,$ что температура совершает затухающие колебания (см. рис. 4.1). Подстановка выражения (4.48) в уравнения динамики (4.46) дает:

$$\ddot{u} = c_s^2 u'' - \lambda c_s^2 \beta \Delta T J_0(\omega t) \cos(\lambda x).$$
(4.49)

Видно, что температура играет роль внешней силы, возбуждающей первую собственную форму механических колебаний. Из асимптотических свойств функции Бесселя J<sub>0</sub> следует, что внешняя сила — почти периодическая функция с частотой  $\omega$ . Заметим, что данная частота совпадает с первой собственной частотой системы. Амплитуда силы затухает как 1/√t.

Решение уравнения (4.49) дает точное выражение для перемещений:

$$u(x,t) = z(t)\cos(\lambda x), \qquad z(t) = -\beta\Delta T \,\omega t J_1(\omega t)/\lambda.$$
 (4.50)

На больших временах ( $\omega t \to \infty$ ) амплитуда перемещений, z, имеет следующую асимптотику

$$z(t) \approx -\sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\beta \Delta T}{\lambda} \sqrt{\omega t} \cos\left(\omega t - \frac{3\pi}{4}\right).$$
(4.51)

Формула (4.51) показывает, что амплитуда растет пропорционально  $\sqrt{t}$ . Соответствующая механическая энергия,  $\mathcal{E}$ , вычисляется по формуле

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2L} \int_0^L (\rho v^2 + E u'^2) \,\mathrm{d}x = \mathcal{E}_* \omega^2 t^2 \Big[ J_0^2(\omega t) + J_1^2(\omega t) \Big], \tag{4.52}$$

где  $\mathcal{E}_* = E\beta^2\Delta T^2/4^{-1}$ . На больших временах энергия растет линейно  $\mathcal{E} \approx 2\mathcal{E}_*\omega t/\pi$ .

Таким образом, совпадение частоты температурных колебаний с первой собственной частотой цепочки приводит к возбуждению механических колебаний с растущей амплитудой. Данное явление будем называть баллистическим резонансом.

В силу линейности задачи полученные выше результаты нетрудно распро-

 $<sup>1^{1}</sup>$ Величина  $\mathcal{E}_{*}$  пропорциональна потенциальной энергии деформации стесненного стержня, нагретого на  $\Delta T$ .

странить на случай произвольного периодического распределения температуры  $T_0(x) = T_0(x+L)$ . Разложим профиль начальной температуры в ряд Фурье:

$$T_{0} = \frac{a_{0}}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} \left[ a_{k} \cos\left(\lambda_{k}x\right) + b_{k} \sin\left(\lambda_{k}x\right) \right], \quad \lambda_{k} = k\lambda,$$

$$a_{k} = \frac{2}{L} \int_{0}^{L} T_{0}(x) \cos(\lambda_{k}x) dx, \qquad b_{k} = \frac{2}{L} \int_{0}^{L} T_{0}(x) \sin(\lambda_{k}x) dx.$$

$$(4.53)$$

Решение уравнений (4.46) с учетом распределения кинетической температуры (4.53) получается с использованием формулы (4.50) и принципа суперпозиции:

$$u = \beta c_s t \sum_{k=1}^{\infty} J_1(\omega_k t) \Big[ a_k \sin(\lambda_k x) - b_k \cos(\lambda_k x) \Big], \qquad (4.54)$$

где  $\omega_k = k\omega = k\lambda c_s$ . Формула (4.54) показывает, что резонируют все собственные формы, входящие в разложение функции  $T_0$ . Амплитуды собственных форм растут как  $\sqrt{t}$ . Однако в силу того, что коэффициенты Фурье  $a_k$ ,  $b_k$  обычно убывают с ростом k, основной вклад в рост амплитуды механических колебаний вносят длинноволновые гармоники (малые k).

Таким образом, баллистический резонанс проявляется при произвольном периодическом распределении начальной кинетической температуры.

#### 4.2.9 Сравнение с результатами моделирования

Для сравнения предсказаний континуальной теории с результатами численного решения уравнений движения (4.44) определим связь микро- и макропараметров системы. Как и ранее, будем разделять движения частиц на механические и тепловые [105]. Механическим будем называть движение, соответствующее математческом ожиданию перемещений, т.е.  $u(na,t) = \langle u_n \rangle$ , где a – шаг решетки,  $\langle \dots \rangle$  – математическое ожидание. Тепловое движение  $\tilde{u}_n$  ассоциируется с оставшейся частью перемещения  $\tilde{u}_n = u_n - \langle u_n \rangle$ . Аналогичное разделение проводится для скоростей частиц. Тогда кинетическая температура,  $T_n$ , частицы n

определяется соотношением:

$$k_B T_n = m \left\langle \tilde{v}_n^2 \right\rangle, \tag{4.55}$$

где  $k_B$  — постоянная Больцмана.

Макроскопическая длина, плотность, модель Юнга, скорость звука, теплоемкость и коэффициент теплового расширения цепочки (4.44) связаны с микропараметрами следующими соотношениями [105]

$$L = Na, \qquad \rho = \frac{m}{a}, \qquad E = Ca, \qquad c_s = a\sqrt{\frac{C}{m}},$$
  
$$c_V = \frac{k_B}{m}, \qquad \beta = -\frac{\alpha k_B}{aC^2}.$$
 (4.56)

Здесь коэффициент теплового расширения вычислен по формуле  $\beta = \Gamma c_V \rho / E$ , где  $\Gamma = -\alpha a / C$  — параметр Грюнайзена (см. например [105]).

Для проверки результатов, получающихся в рамках макроскопической термоупругости, проводится численное решение уравнений динамики цепочки. Уравнения решаются численно при периодических граничных условиях и начальных условиях (4.45). Для численного решения используется симплектический интегратор четвертого порядка [20] с оптимизированными параметрами [145]. В расчетах полная энергия системы сохраняется с точностью 0.001%.

Для вычисления макроскопических механических характеристик системы проводится осреднение по  $N_r$  реализациям системы (4.44) со случайными начальными условиями (4.45). Амплитуда механических колебаний, z(t), и механическая энергия,  $\mathcal{E}$ , вычисляются по формулам:

$$z \approx -\frac{1}{\pi} \sum_{n=0}^{N-2} \left\langle u_{n+1} - u_n \right\rangle_r \sin \frac{2\pi n}{N},$$
  

$$\dot{z} \approx \frac{2}{N-1} \sum_{n=0}^{N-1} \left\langle v_n \right\rangle_r \cos \frac{2\pi n}{N}, \quad \mathcal{E} = \frac{m}{4a} \left( \dot{z}^2 + \omega^2 z^2 \right).$$
(4.57)



Рис. 4.1: Колебания температуры, вызванные квазибаллистическим распространением тепла. Приведено аналитическое решение (4.48) (линия) и результаты численного интегрирования уравнений движения для  $\alpha a/C = -0.25$  (красные квадраты) и -1 (синие круги).

Здесь  $\left< \dots \right>_r$  — осреднение по реализациям.

Для исследования влияния нелинейности фиксируется фоновая температура  $T_b$  и меняется параметр  $\alpha$ . В моделировании используются следующие значения параметров:  $\Delta t = 0.05\tau_*, t_{max} = 1.4 \cdot 10^4\tau_*, \Delta T = 0.5T_b, v_0 = 0.1c_s, N = 10^3, N_r = 10^4$ . Здесь  $v_0$  — амплитуда случайных начальных скоростей, соответствующих температуре  $2T_b$ . Параметр нелинейности  $\alpha a/C$  варьируется в интервале [-1; 0].

Рассмотрим поведение кинетической температуры цепочки. Аналитическое решение (4.48) показывает, что профиль температуры остается синусоидальным. С использованием данного факта вычисляется амплитуда температурного профиля A(t) (см. формулу (4.48)). В расчетах температура вычисляется по определению (4.55). Можно показать, что вклад  $\langle v_n \rangle$  в амплитуду A мал. Поэтому в формуле (4.55) используется полное значение скорости  $v_n$  вместо тепловой компоненты  $\tilde{v}_n$ . Амплитуда температуры для  $\alpha a/C = -0.25$  и  $\alpha a/C = -1$  показана на рис. 4.1. Для обоих значений  $\alpha$  температура совершает затухающие колебания. Данные колебания приводят к баллистическому резонансу. Для



Рис. 4.2: Рост амплитуды механических колебаний при баллистическом резонансе. Показаны аналитическое решение (4.50) (сплошная линия) и численные результаты при  $\alpha a/C = -0.25$  (круги) и -1 (квадраты).

 $\alpha a/C = -0.25$  колебания температуры хорошо описываются аналитическим решением (4.48). Отклонения от аналитического решения  $\alpha a/C = -1$  связаны с нелинейными эффектами, которые откидывались при выводе формулы (4.46).

Изменение амплитуды механических колебаний z(t) показано на рис. 4.2. Видно, что амплитуда со временем растет. На небольших временах рост хорошо описывается аналитическим решением (4.50). С течением времени аналитическое решение отклоняется от численного. Скорость отклонения увеличивается с увеличением параметра нелинейности  $\alpha$ .

Рост амплитуды механических колебаний связан с частичным переходом тепловой энергии в механическую. Данный переход хорошо виден на рис. 4.3. Рисунок показывает, что в начале механическая энергия растет, как и предсказывается аналитическим решением (4.52). При этом полная энергия системы сохраняется, поэтому рост механической энергии может происходить только за счет уменьшения тепловой энергии.


Рис. 4.3: Макроскопическая механическая энергия системы  $\mathcal{E}$ . Показано аналитическое решение (4.52) (сплошная линия) и результаты моделирования для  $\alpha a/C = -0.25$  (точки), -0.5 (пунктир), -0.75 (штрих-пунктир) и -1 (штрих-пунктир с двумя точками).

### 4.2.10 О переходе механической энергии в тепловую в цепочке ФПУ

Численное решение уравнений динамики цепочки показывает, что механические колебания, вызванные баллистическим резонансом со временем затухают (см. рис. 4.4). Затухание связано с термализацией, т.е. переходом механической энергии в тепловую. Данный процесс не описывается континуальной моделью (4.46). Поэтому далее представлены только результаты моделирования.

Затухание механической энергии показано на рис. 4.3. Видно, что механическая энергия достигает максимального значения, зависящего от параметра нелинейности  $\alpha$  и затем монотонно стремится к нулю. Зависимость максимальной механической энергии, возбуждаемой при баллистическом резонансе  $\mathcal{E}_{max}$ , нормированная на полную энергию цепочки  $H_0$ , показана на рис. 4.5. Видно, что  $\mathcal{E}_{max}$  растет с увеличением коэффициента  $\alpha$ , характеризующего нелинейность. Для всех рассмотренных значений  $\alpha$  максимальная механическая энергия на



Рис. 4.4: Затухание энергии механических колебаний на больших временах (численные результаты для  $\alpha a/C = -1$ ).



Рис. 4.5: Максимальная механическая энергия  $\mathcal{E}_{max}$ , возбуждаемая при баллистическом резонансе при различных значениях  $\alpha$ . Здесь  $H_0$  — полная энергия цепочки.

несколько порядков меньше, чем тепловая энергия. Отметим, что в классической постановке задачи ФПУ [48] ситуация обратная, т.к. тепловая энергия равна нулю, а механическая — конечна.

Таким образом, при рассмотренных начальных условиях механическая энергия цепочки монотонно переходит в тепловую. Данный результат согласуется с результатами моделирования, проведенного в работе [199] при других начальных условиях. В работе [199] рассматривалось затухание первой собственной формы колебаний при наличии теплового фона. Результаты настоящей работы и работы [199] показывают, что добавление конечного теплового движения устраняет парадокс возвращения (recurrence paradox), присутствующий при решении задачи ФПУ в оригинальной постановке [48].

#### 4.2.11 Результаты параграфа 4.2

В настоящем параграфе, исходя из уравнений динамики одномерной цепочки, выведена система уравнений связанной линейной термоупругости. Получены выражения, связывающие микро- и макроскопические параметры цепочки. Определен вид свободной энергии Гельмгольца для цепочки. Для примера рассмотрена задача термоупругости для цепочки Ферми-Паста-Улама. Для описания переноса тепловой энергии в цепочке использовано решение, полученное в главе 3 в линейном приближении. Показано, что в цепочке с синусоидальным распределением начальной температуры возникает механический резонанс. За счет баллистического характера переноса тепла температура цепочки совершает колебания. Неравномерное поле температуры и тепловое расширение приводят к появлению температурных напряжений, играющих роль периодической внешней силы, возбуждающей макроскопические механические колебания. Частота данной внешней силы оказывается равной первой собственной частоте цепочки, в результате чего возникает резонанс. Показано, что данное явление хорошо описывается предложенной континуальной моделью. Отметим, что в отличие от обычного механического резонанса баллистический резонанс возникает в отсутствие внешнего воздействия. Полученные результаты могут быть обобщены на многомерный случай. Можно предположить, что в двумерном и трехмерном случаях эффект, связанный с баллистическим резонансом, будет слабее, т.к. колебания температуры затухают тем быстрее, чем больше размерность пространства (данный факт показан в главе 3).

Приведенные результаты моделирования показывают, что механические колебания, возникающие при резонансе, затухают монотонно. Поэтому классический парадокс ФПУ не наблюдается при конечной температуре. В наших расчетах механическая энергия системы существенно ниже, чем тепловая. Повидимому, данное условие является необходимым для монотонного затухания. Однако для строгого доказательства данного утверждения требуются дальнейшие исследования.

# 4.3 Линейная термоупругость двумерных и трехмерных кристаллов

В настоящем параграфе рассматривается обобщение описанного выше подхода к описанию термоупругости кристаллических твердых тел на многомерный случай. Проводится континуализация уравнений динамики кристаллов с парными взаимодействиями. Получаются выражения для тензоров напряжений Коши и Пиоала. С использованием данных выражений выводится определяющее соотношение Ми-Грюнайзена и выражение для коэффициента теплового расширения. Определяются условия, которым должен удовлетворять потенциал межчастичного взаимодействия, для того чтобы коэффициент теплового расширения был отрицательным.

#### 4.3.1 Континуализация уравнений динамики

В настоящем параграфе проводится континуализация уравнений динамики кристалла с парными взаимодействиями [243, 107, 111]. Выводятся выражения, связывающие тензоры напряжений Коши и Пиола со структурой решетки и силами межчастичного взаимодействия.

Рассматриваются бесконечные кристаллы простой структуры в простран-

стве размерности d = 1, 2 или 3. Считается, что существует однозначное соответствие между исходной (недеформированной) конфигурацией и текущей конфигурацией. Радиус-векторы эквивалентного континуума в исходной и начальной конфигурациях обозначаются **r** и **R** соответственно. Связь между мерами деформации сплошной среды и деформациями связей решетки выводится следующим образом. Рассматривается некоторая отсчетная частица кристалла. Соседние частицы нумеруются индексом  $\alpha$ . Вектор, соединяющий отсчетную частицу с ее соседом  $\alpha$  в недеформированной конфигурации, обозначается **a**<sub> $\alpha$ </sub>. По определению векторы **a**<sub> $\alpha$ </sub> имеют следующее свойство:

$$\mathbf{a}_{\alpha} = -\mathbf{a}_{-\alpha}.\tag{4.58}$$

В текущей конфигурации вектор, соединяющий частицу с ее соседом  $\alpha$ , представляется в виде суммы его математического ожидания  $\mathbf{A}_{\alpha}$  и оставшейся тепловой части  $\widetilde{\mathbf{A}}_{\alpha}$  такой, что  $\left\langle \widetilde{\mathbf{A}}_{\alpha} \right\rangle = 0$ . Считается, что математические ожидания положений частиц в текущей конфигурации соответствуют положениям соответствующих точек континуума. Тогда континуализация вектора  $\mathbf{A}_{\alpha}$  дает

$$\mathbf{A}_{\alpha} = \mathbf{R}(\mathbf{r} + \mathbf{a}_{\alpha}) - \mathbf{R}(\mathbf{a}_{\alpha}) \approx \mathbf{a}_{\alpha} \cdot \stackrel{\circ}{\nabla} \mathbf{R}, \qquad (4.59)$$

где  $\overset{\circ}{\nabla}$  — набла-оператор в отсчетной конфигурации. При этом предполагается, что математическое ожидание деформации связи медленно меняется на расстояниях порядка равновесного. В литературе формула (4.59) иногда называется соотношением Коши-Борна. Из формулы (4.59) получается следующее выражение для деформационного градиента:

$$\stackrel{\circ}{\nabla} \mathbf{R} = \left(\sum_{\alpha} \mathbf{a}_{\alpha} \mathbf{a}_{\alpha}\right)^{-1} \cdot \sum_{\alpha} \mathbf{a}_{\alpha} \mathbf{A}_{\alpha}.$$
(4.60)

Таким образом, формулы (4.59), (4.60) связывают деформации связей в кри-

сталле с деформациями эквивалентной сплошной среды.

Рассмотрим вывод континуальных уравнений баланса из дискретных уравнений движения кристалла. Уравнение движения отсчетной частицы имеет вид

$$m\ddot{\mathbf{u}} = \sum_{\alpha} \mathbf{F}_{\alpha},\tag{4.61}$$

где **F**<sub>\alpha</sub> — сила, действующая на отсчетную частицу со стороны ее соседа \alpha, m — масса частицы. Вычислим математическое ожидание от обеих частей уравнения (4.61). Для континуализации воспользуемся третьим законом Ньютона

$$\mathbf{F}_{\alpha}(\mathbf{r}) = -\mathbf{F}_{-\alpha}(\mathbf{r} + \mathbf{a}_{\alpha}), \qquad \left\langle \mathbf{F}_{\alpha} \right\rangle(\mathbf{r}) \approx -\left\langle \mathbf{F}_{-\alpha} \right\rangle(\mathbf{r}) - \mathbf{a}_{\alpha} \cdot \stackrel{\circ}{\nabla} \left\langle \mathbf{F}_{-\alpha} \right\rangle(\mathbf{r}). \quad (4.62)$$

Тогда уравнение движения (4.61) в континуальном пределе принимает вид

$$\frac{m}{V_0} \left\langle \ddot{\mathbf{u}} \right\rangle = \overset{\circ}{\nabla} \cdot \left( \frac{1}{2V_0} \sum_{\alpha} \mathbf{a}_{\alpha} \left\langle \mathbf{F}_{\alpha} \right\rangle \right), \qquad V_0 = \frac{\sqrt{5-d}}{2} a^d, \tag{4.63}$$

где *а* — равновесное расстояние, *V*<sub>0</sub> — объем элементарной ячейки в недеформированном состоянии (объем, приходящийся на частицу в идеальной бесконечной решетке [239]). Уравнение (4.63) имеет такую же форму, как и континуальное уравнение баланса импульса в отсчетной конфигурации:

$$\rho_0 \ddot{\mathbf{u}} = \stackrel{\circ}{\nabla} \cdot \mathbf{P}, \tag{4.64}$$

где **Р** — тензор напряжений Пиола,  $\rho_0$  — плотность в отсчетной конфигурации. Сравнение уравнений (4.63), (4.64) дает следующую связь тензора Пиола **Р** с силами межчастичного взаимодействия:

$$\mathbf{P} = \frac{1}{2V_0} \sum_{\alpha} \mathbf{a}_{\alpha} \left\langle \mathbf{F}_{\alpha} \right\rangle. \tag{4.65}$$

Аналогичные рассуждения в деформированной конфигурации дают выражение

для тензора напряжений Коши:

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{2V} \sum_{\alpha} \mathbf{A}_{\alpha} \left\langle \mathbf{F}_{\alpha} \right\rangle, \tag{4.66}$$

где V — объем, приходящийся на частицу в текущей конфигурации. Формулы (4.65), (4.66) позволяют вычислить тензоры напряжений Коши и Пиола при известных силах и геометрии кристалла.

Отметим, что описанный выше подход позволяет найти тензор напряжений только с точностью до поля с нулевой дивергенцией. Кроме того, приведенные выше рассуждения основаны на предположении, что полная сила, действующая на частицу, может быть представлена в виде суммы сил  $\mathbf{F}_{\alpha}$ . В случае парных взаимодействий данное предположение, очевидно, выполняется. Случай многочастичных взаимодействий рассматривается в работе [106]. Показано, что аналогичное представление для силы возможно и в этом случае. Однако данное представление может быть не единственно.

В следующих параграфах выражение для тензора напряжений используется для вывода формулы для коэффициента теплового расширения.

#### 4.3.2 Коэффициент теплового расширения

В настоящем параграфе выводится формула, связывающая коэффициент теплового расширения кристалла с параметрами потенциала взаимодействия.

Представим тензор напряжений в виде суммы холодной и тепловой частей:

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}_0 + \boldsymbol{\sigma}_T, \qquad \boldsymbol{\sigma}_0 = \boldsymbol{\sigma}|_{\widetilde{\mathbf{A}}_{\alpha}=0} = -\frac{1}{2V} \sum_{\alpha} \Phi(A_{\alpha}^2) \mathbf{A}_{\alpha} \mathbf{A}_{\alpha}, \qquad \boldsymbol{\sigma}_T = \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}_0,$$
(4.67)

где функция Ф определена формулой (4.86). Для холодной части тензора напряжений выполняется следующее определяющее соотношение, получающееся за счет подстановки (4.59) в формулу (4.66) (см. работу [99]):

$$\boldsymbol{\sigma}_{0} = -\frac{1}{2V_{0}\sqrt{\det \mathbf{C}}} (\overset{\circ}{\nabla} \mathbf{R})^{T} \cdot \sum_{\alpha} \Phi(\mathbf{a}_{\alpha}\mathbf{a}_{\alpha} \cdot \cdot \mathbf{C}) \mathbf{a}_{\alpha}\mathbf{a}_{\alpha} \cdot \overset{\circ}{\nabla} \mathbf{R}, \qquad \mathbf{C} = \overset{\circ}{\nabla} \mathbf{R} \cdot \left(\overset{\circ}{\nabla} \mathbf{R}\right)^{T},$$
(4.68)

где С — мера деформации Коши-Грина.

Получим теперь уравнение состояния для тепловой части тензора напряжений. Рассмотрим тепловую энергию:

$$U_T = \frac{m}{2} \left\langle \widetilde{\mathbf{v}}^2 \right\rangle + \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \left\langle \Pi \left( A_{\alpha} + \widetilde{\mathbf{A}}_{\alpha} \right) \right\rangle - \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \Pi \left( A_{\alpha} \right).$$
(4.69)

Кинетическая часть тепловой энергии выражается через  $\widetilde{\mathbf{A}}_{\alpha}$  с использованием теоремы о вириале [243]:

$$\frac{m}{2} \left\langle \widetilde{\mathbf{v}}^2 \right\rangle \approx \frac{1}{4} \sum_{\alpha} \left\langle \widetilde{\mathbf{A}}_{\alpha} \cdot \mathbf{F}_{\alpha} \left( \mathbf{A}_{\alpha} + \widetilde{\mathbf{A}}_{\alpha} \right) \right\rangle.$$
(4.70)

Следовательно, тепловая энергия представляется в виде функции векторов  $\widetilde{\mathbf{A}}_{\alpha}$ , описывающих тепловые деформации связей. Тензор напряжений также зависит от  $\widetilde{\mathbf{A}}_{\alpha}$ .

Разложим тензор напряжений  $\sigma_T$  и тепловую энергию  $U_T$  в ряд по  $\widetilde{\mathbf{A}}_{\alpha}$ . В первом приближении получим:

$$\boldsymbol{\sigma}_{T} \approx -\frac{1}{2V} \sum_{\alpha} \left[ 2\Phi' \mathbf{A}_{\alpha} \mathbf{E} \mathbf{A}_{\alpha} + \Phi' \mathbf{A}_{\alpha} \mathbf{A}_{\alpha} \mathbf{E} + 2\Phi'' \mathbf{A}_{\alpha} \mathbf{A}_{\alpha} \mathbf{A}_{\alpha} \mathbf{A}_{\alpha} \right] \cdot \cdot \left\langle \widetilde{\mathbf{A}}_{\alpha} \widetilde{\mathbf{A}}_{\alpha} \right\rangle,$$
$$U_{T} \approx -\frac{1}{2} \sum_{\alpha} \left[ \Phi \mathbf{E} + 2\Phi' \mathbf{A}_{\alpha} \mathbf{A}_{\alpha} \right] \cdot \cdot \left\langle \widetilde{\mathbf{A}}_{\alpha} \widetilde{\mathbf{A}}_{\alpha} \right\rangle.$$
(4.71)

Формулы (4.71) показывают, что тепловая энергия и тензор напряжений зависят от симметричных тензоров  $\langle \widetilde{\mathbf{A}}_{\alpha} \widetilde{\mathbf{A}}_{\alpha} \rangle$ . Для получения уравнения состояния необходимо исключить данные тензора из формулы (4.71). В работе [243] для этого используется следующее силовое предположение

$$\left\langle \widetilde{\mathbf{A}}_{\alpha}\widetilde{\mathbf{A}}_{\alpha}\right\rangle = \frac{1}{d}\xi^{2}\mathbf{E}, \qquad \xi^{2} = \left\langle \widetilde{\mathbf{A}}_{\alpha}^{2}\right\rangle.$$
 (4.72)

В таком случае тепловое давление и тепловая энергия являются функциями одного скалярного параметра  $\xi^2$ , описывающего деформации связей, вызванные тепловым движением. Исключая данный параметр из формул (4.71), получим

$$\boldsymbol{\sigma}_{T} = \frac{\mathbf{G}}{V} U_{T}, \qquad \mathbf{G} = \frac{\sum_{\alpha} \left( (d+2)\Phi' + 2\Phi'' A_{\alpha}^{2} \right) \mathbf{A}_{\alpha} \mathbf{A}_{\alpha}}{\sum_{\alpha} \left( d\Phi + 2\Phi' A_{\alpha}^{2} \right)}, \qquad (4.73)$$

где тензор **G** связан с обычным коэффициентом Грюнайзена следующим образом:  $\Gamma = -\frac{1}{d} \text{tr} \mathbf{G}$ . В случае взаимодействия ближайших соседей выражение для коэффициента Грюнайзена принимает вид:

$$\Gamma = -\frac{\Pi'' A^2 + (d-1) \left[\Pi'' A - \Pi'\right]}{2d(\Pi'' A + (d-1)\Pi')}.$$
(4.74)

Частный случай формулы (4.74) для гранецентрированной кубической решетки (d = 3) получен в работе [86]. Отметим, что в соответствии с формулой (4.74), коэффициент Грюнайзена может быть отрицательным. Данный случай, соответствующий отрицательному тепловому расширению, рассматривается более подробно в следующем параграфе.

В одномерном случае предположение (4.72) выполняется тождественно и, следовательно, формула (4.74) является точным следствием формул (4.71). В многомерном случае компьютерное моделирование показывает, что предположение (4.72) не выполняется и тензоры  $\langle \widetilde{\mathbf{A}}_{\alpha} \widetilde{\mathbf{A}}_{\alpha} \rangle$  не являются шаровыми. В таком случае необходимы дополнительные соотношения для замыкания системы (4.71).

В двумерном случае при взаимодействии ближайших соседей уравне-

ния (4.71) содержат дополнительный неизвестный параметр

$$\beta_{\alpha} = \frac{\left\langle \left( \widetilde{\mathbf{A}}_{\alpha} \cdot \mathbf{n}_{\alpha} \right)^{2} \right\rangle}{\left\langle \left( \widetilde{\mathbf{A}}_{\alpha} \cdot \mathbf{e}_{\alpha} \right)^{2} \right\rangle},\tag{4.75}$$

определяющий связь между продольными и поперечными (в плоскости) деформациями связей, вызванными тепловым движением. Здесь  $\mathbf{e}_{\alpha} = \mathbf{a}_{\alpha}/|\mathbf{a}_{\alpha}|$ ;  $\mathbf{n}_{\alpha}$  нормаль к вектору  $\mathbf{e}_{\alpha}$  в плоскости решетки. Для треугольной решетки с взаимодействиями ближайших соседей,  $\beta_{\alpha}$  в силу симметрии не зависит от  $\alpha$ . Поэтому индекс  $\alpha$  далее будет опущен. Тогда коэффициент Грюнайзена выражается через  $\beta$  следующим образом [256]

$$\Gamma = -\frac{\Pi'' A^2 + \beta \left[\Pi'' A - \Pi'\right]}{4(\Pi'' A + \beta \Pi')},$$
(4.76)

Параметр β может быть оценен в рамках гармонического приближения. В параграфе 2.3.7.3 для этого используется численное решение уравнения динамики ковариаций перемещений. Решение дает β ≈ 1.43. Данное значение находится в хорошем соответствии с результатами молекулярно-динамического моделирования, проводившегося в работе [256].

В трехмерном случае для каждой связи есть два параметра, характеризующие связь между продольными деформациями и поперечными деформациями в двух направлениях, ортогональных к связи. Исследование данного вопроса методом молекулярной динамики проводилось в работе [5]. Параметры, аналогичные  $\beta_{\alpha}$ , были вычислены для гранецентрированной кубической решетки с взаимодействиями Леннарда-Джонса.

Таким образом, разложение тензора напряжений и тепловой энергии в ряд позволяет получать определяющие соотношения. В первом приближении получается обобщенное (тензорное) уравнение в форме Ми-Грюнайзена. Оставляя большее количество членов в разложении, можно получить более точные, нелинейные по тепловой энергии, уравнения состояния, аналогичные уравнению (4.103) (см. например работу [243]).

## 4.3.3 Условие возникновения отрицательного теплового расширения

Отрицательное тепловое расширение обычно наблюдается в неплотноупакованных решетках (например, лед [176], графен [216] и др.) и сложных полиатомных решетках (например, в Cu<sub>2</sub>O [66], ZrW<sub>2</sub>O<sub>8</sub> [147], бета-кварце [207], некоторых зеолитах [45] и т.д.). Однако в работе [177] показано, что отрицательным коэффициентом теплового расширения могут также обладать плотноупакованные решетки с парными силовыми взаимодействиями. В данной работе был предложен потенциал, обеспечивающий отрицательное тепловое расширение. Основная идея получения данного потенциала состояла в том, что "a sufficient condition for a potential to give rise to a system with NTE behavior is that it exhibits a softened interior core within a basin of attraction". Математически "softened interior core" означает положительную третью производную потенциала взаимодействия в положении равновесия. Ниже будет показано, что данное условие является (i) необходимым и достаточным в одномерном случае и (ii) достаточным в двумерном и трехмерном случаях. В последнем случае условие не является необходимым. Иными словами, показано, что в многомерном случае отрицательное тепловое расширение может наблюдаться даже в случае, когда третья производная потенциала в положении равновесия равна нулю или даже отрицательна. Ранее отмечалось, что коэффициент теплового расширения имеет тот же знак, что и коэффициент Грюнайзена Г. Поэтому далее рассматривается зависимость знака коэффициента Грюнайзена от параметров потенциала межчастичного взаимодействия.

Сначала рассмотрим одномерную цепочку, состоящую из одинаковых частиц. Ближайшие соседи взаимодействуют посредством потенциала *П*. В таком случае коэффициент Грюнайзена нерастянутой цепочки имеет вид (см. например, работу [101]):

$$\Gamma = -\frac{\Pi^{\prime\prime\prime}(a)a}{2\Pi^{\prime\prime}(a)},\tag{4.77}$$

где *а* — равновесное расстояние. Формула (4.77) дает условие, при котором реализуется отрицательное тепловое расширение

$$\Pi'''(a) > 0. \tag{4.78}$$

Видно, что в одномерном случае положительность третьей производной является необходимым и достаточным условием реализации отрицательного теплового расширения.

Рассмотрим простейший пример, показывающий, что в двумерном и трехмерном случаях условие (4.78) не является необходимым для реализации отрицательного теплового расширения. Предположим, что взаимодействия между частицами физически линейные (частицы соединены линейными пружинами). В работах [191, 192] показано аналитически и численно, что тепловое расширение в таком случае отрицательно. Следовательно, условие (4.78) не является необходимым.

Для того, чтобы вывести необходимое и достаточное условие, требуется точное выражение, связывающее коэффициент Грюнайзена с параметрами потенциала. К сожалению, на данный момент доступны только приближенные выражения для коэффициента Грюнайзена, приведенные в предыдущем параграфе. В частности, коэффициент Грюнайзена для простых двумерных и трехмерных решеток с взаимодействиями ближайших соседей в положении равновесия имеет вид:

$$\Gamma = -\frac{\Pi''(a)a + (d-1)\Pi''(a)}{2d\Pi''(a)}.$$
(4.79)

Отметим качественное отличие одномерного случая от многомерного. В одномерном случае тепловое расширение возможно только за счет физической нелинейности потенциала взаимодействия. Поэтому знак коэффициента теплового расширения определяется знаком третьей производной потенциала. В многомерном случае наряду с физической нелинейностью присутствует геометрическая нелинейность. Иными словами, колебания частиц описываются нелинейными уравнениями даже в случае, когда они соединены физически линейными пружинами. Поэтому в многомерном случае условие реализации отрицательного теплового расширения содержит  $\Pi''$  и  $\Pi'''$ :

$$\Pi'''(a)a > -(d-1)\Pi''(a).$$
(4.80)

Данная формула напрямую следует из (4.79). Величина в правой части отрицательна при d > 1. Следовательно, в многомерном случае отрицательное тепловое расширение может проявляться даже при отрицательной третьей производной потенциала. Следовательно класс потенциалов, приводящих к отрицательному тепловому расширению, существенно шире, чем предложенный в работе [177].

Рассмотрим для примера следующий потенциал:

$$\Pi(r) = \frac{c}{2}(r-a)^2 \left(1 + \frac{\alpha}{3a}(r-a)\right), \qquad \alpha = \frac{\Pi''(a)a}{\Pi''}.$$
(4.81)

Параметр  $\alpha$  характеризует нелинейность межчастичных взаимодействий. При  $\alpha = 0$  потенциал (4.81) становится гармоническим. Коэффициент Грюнайзена для такого потенциала имеет вид:

$$\Gamma = -\frac{\alpha + d - 1}{2d}.\tag{4.82}$$

Подстановка данного выражения в формулу (4.80) приводит к следующему условию реализации отрицательного теплового расширения:

$$\alpha > 1 - d. \tag{4.83}$$

Для потенциалов Леннарда-Джонса, Морзе и Ми параметр  $\alpha$  равен:

$$\Pi = D\left(\left(\frac{a}{r}\right)^{12} - 2\left(\frac{a}{r}\right)^6\right) \Rightarrow \alpha = -21,$$
  

$$\Pi = D\left(e^{2b(a-r)} - 2e^{b(a-r)}\right) \Rightarrow \alpha = -3ba,$$
  

$$\Pi = \frac{D}{n-m}\left(m\left(\frac{a}{r}\right)^n - n\left(\frac{a}{r}\right)^m\right) \Rightarrow \alpha = -3 - n - m,$$
  
(4.84)

где *b* — параметр потенциала Морзе, *n*, *m* — параметры потенциала Ми. Видно, что для реалистичных параметров потенциалов Леннарда-Джонса, Морзе и Ми коэффициент теплового расширения больше нуля.

Таким образом, получено условие (4.80) реализации в кристалле отрицательного расширения. Как и формула для коэффициента Грюнайзена, формула (4.80) является приближенной.

#### 4.3.4 Результаты параграфа 4.3

В данном параграфе проведена континуализация уравнений динамики многомерных кристаллов с парными взаимодействиями. Получены выражения для тензоров напряжений Коши и Пиола. Выведена формула, связывающая коэффициент Грюнайзена с параметрами потенциала взаимодействия и структурой решетки. Показано, что для уточнения данной формулы могут использоваться результаты главы 2. Получено условие, при котором тепловое расширение кристалла становится отрицательным. Показано, что данное условие выполняется только для достаточно специфических потенциалов взаимодействия между частицами. Для потенциалов Морзе, Ми и Леннарда-Джонса с реалистичными значениями параметров коэффициент теплового расширения кристаллов с парными взаимодействиями больше нуля. Полученные результаты могут использоваться при конструировании потенциалов взаимодействия для моделирования твердых тел с отрицательным коэффициентом теплового расширения.

# 4.4 Нелинейные определяющие соотношения термоупругости квазиодномерной цепочки

В предыдущих параграфах исследовалось линейное термоупругое поведение кристаллических твердых тел. Для этого использовалось определяющее соотношение Дюамеля-Неймана, дающее линейную зависимость тепловых напряжений от деформации и температуры. Такая модель хорошо описывает поведение тел в случае малых деформаций и температур. В общем случае коэффициент теплового расширения (или коэффициент Грюнайзена) может сильно зависеть от деформации. Более того, зависимость тепловых напряжений от температуры может быть существенно нелинейной. В настоящем параграфе данные нелинейные термомеханические эффекты рассматриваются на примере цепочки, совершающей продольные и поперечные колебания в плоскости. Для данной модели перечисленные нелинейные термомеханические эффекты проявляются наиболее ярко.

#### 4.4.1 Связь микро- и макропараметров

Рассмотрим цепочку частиц одинаковой массы, совершающую продольные и поперечные колебания в двумерном случае. Каждая частица взаимодействует с ближайшими соседями, обозначаемыми индексами 1 и —1 посредством парного потенциала взаимодействия. При отсутствии теплового движения расстояние между ближайшими соседями больше либо равно равновесному расстоянию, т.е. цепочка растянута. Рассматривается однородно нагретая цепочка. При этом средние характеристики всех частиц одинаковы и достаточно рассматривать только одну отсчетную частицу.

Вектор, соединяющий данную частицу с ее соседом номер 1, представляется в виде  $\mathbf{A} + \widetilde{\mathbf{A}}$ , где  $\mathbf{A} = A\mathbf{e}$ , A — расстояние между частицами при отсутствии теплового движения,  $\mathbf{e}$  — вектор, направленный вдоль цепочки,  $\widetilde{\mathbf{A}}$  — изменение вектора, соединяющего частицы, вызванное тепловым движением. По определению математическое ожидание  $\widetilde{\mathbf{A}}$  равно нолю. Частицы взаимодействуют посредством парного потенциала  $\Pi\left((\mathbf{A}+\widetilde{\mathbf{A}})^2\right)$ . Предполагается, что потенциал задан достаточно гладкой функцией.

Уравнение движения отсчетной частицы имеет вид

$$m\dot{\boldsymbol{v}} = \mathbf{F}_1 + \mathbf{F}_{-1}, \quad \mathbf{F}_1 = 2\Pi' \left( (\mathbf{A} + \widetilde{\mathbf{A}})^2 \right) \left( \mathbf{A} + \widetilde{\mathbf{A}} \right),$$
(4.85)

где **F**<sub>1</sub>, **F**<sub>-1</sub> — силы, действующие на отсчетную частицу со стороны частиц 1 и —1 соответственно. Здесь и далее штрихом обозначается производная по аргументу.

Макроскопические параметры модели определяются следующим образом. Полное напряжение  $\sigma$  определяется как математическое ожидание силы, действующей на отсчетную частицу в направлении, задаваемом вектором **e**. Напряжение представляется в виде суммы холодной  $\sigma_0$  и тепловой  $\sigma_T$  компонент:

$$\sigma = \left\langle \mathbf{F}_1 \right\rangle \cdot \mathbf{e}, \qquad \sigma_0 = 2\Pi'(A^2)A, \qquad \sigma_T = \sigma - \sigma_0.$$
(4.86)

Тепловая энергия U<sub>T</sub> цепочки равна сумме кинетической и потенциальной составляющих:

$$U_T = \frac{m}{2} \left\langle \widetilde{\mathbf{v}}^2 \right\rangle + \left\langle \Pi \left( (\mathbf{A} + \widetilde{\mathbf{A}})^2 \right) \right\rangle - \Pi(A^2).$$
(4.87)

Формулы (4.86), (4.87) показывают, что тепловое напряжение и тепловая энергия зависят от векторов  $\widetilde{\mathbf{A}}$ ,  $\widetilde{\mathbf{v}}$ , характеризующих тепловое движение частиц. Для того чтобы исключить из выражения для тепловой энергии тепловые скорости, используется следующее соотношение, справедливое для однородно нагретой цепочки в стационарном состоянии (см. например [243]):

$$\frac{m}{2} \left\langle \widetilde{\mathbf{v}}^2 \right\rangle \approx \frac{1}{2} \left\langle \widetilde{\mathbf{A}} \cdot \mathbf{F}_1 \left( \mathbf{A} + \widetilde{\mathbf{A}} \right) \right\rangle.$$
(4.88)

С учетом данной формулы можно представить тепловое напряжение  $\sigma_T$  и тепловую энергию  $U_T$  в виде функций вектора  $\widetilde{\mathbf{A}}$ . В дальнейшем  $|\widetilde{\mathbf{A}}|/A$  используется в качестве малого параметра. Разложение  $\sigma_T$  и  $U_T$  в ряд по данному параметру позволяет получить уравнения состояния.

#### 4.4.2 Линейное тепловое расширение

Предположим, что деформации связей, вызванные тепловым движением, малы, т.е.  $|\widetilde{\mathbf{A}}| \ll A$ . Тогда тепловое напряжение (4.86) и тепловая энергия (4.87) могут быть разложены в ряд по  $\widetilde{\mathbf{A}}$ . Оставляя в разложении слагаемые до второго порядка включительно, получим:

$$U_{T} = 2 \left( \Pi' \mathbf{E} + 2\Pi'' A^{2} \mathbf{e} \mathbf{e} \right) \cdot \cdot \left\langle \widetilde{\mathbf{A}} \widetilde{\mathbf{A}} \right\rangle,$$
  

$$\sigma_{T} = 2 \left[ \Pi'' A \left( \mathbf{E} + 2\mathbf{e} \mathbf{e} \right) + 2\Pi''' A^{3} \mathbf{e} \mathbf{e} \right] \cdot \cdot \left\langle \widetilde{\mathbf{A}} \widetilde{\mathbf{A}} \right\rangle,$$
(4.89)

где  $\mathbf{e} = \mathbf{A}/A$ ,  $\mathbf{E}$  — двумерный единичный тензор. Формулы (4.89) показывают, что в первом приближении тепловое напряжение и тепловая энергия пропорциональны тензору  $\langle \widetilde{\mathbf{A}} \widetilde{\mathbf{A}} \rangle$ , описывающему деформации связей, вызванные тепловым движением.

Выделим вклад продольных и поперечных колебаний:

$$\widetilde{\mathbf{A}} = \alpha \mathbf{e} + \beta \mathbf{n}, \qquad \left\langle \widetilde{\mathbf{A}} \widetilde{\mathbf{A}} \right\rangle = \left\langle \alpha^2 \right\rangle \mathbf{e} \mathbf{e} + \left\langle \beta^2 \right\rangle \mathbf{n} \mathbf{n} + \left\langle \alpha \beta \right\rangle (\mathbf{e} \mathbf{n} + \mathbf{n} \mathbf{e}), \qquad (4.90)$$

где **n** — вектор единичной нормали к направлению цепочки;  $\langle \alpha^2 \rangle$ ,  $\langle \beta^2 \rangle$  — дисперсии продольных и поперечных деформаций связи;  $\langle \alpha \beta \rangle$  — ковариация продольных и поперечных деформаций. Из уравнений (4.89), (4.90) следует, что

тепловое напряжение и тепловая энергия зависят от параметров  $\langle \alpha^2 \rangle$ ,  $\langle \beta^2 \rangle$ :

$$\sigma_T = 2 \left( 3\Pi'' + 2\Pi'''A^2 \right) A \left\langle \alpha^2 \right\rangle + 2\Pi'' A \left\langle \beta^2 \right\rangle,$$

$$U_T = 2 (\Pi' + 2\Pi''A^2) \left\langle \alpha^2 \right\rangle + 2\Pi' \left\langle \beta^2 \right\rangle.$$
(4.91)

Видно, что в рассматриваемом приближении ковариация продольных и поперечных деформаций не вносит вклад в напряжения и тепловую энергию.

Для получения уравнения состояния необходимы дополнительные соотношения между параметрами  $\langle \alpha^2 \rangle$ ,  $\langle \beta^2 \rangle$ . Данные соотношения выводятся с использованием теоремы о равном распределении [77]. В соответствии с теоремой, кинетические энергии продольных и поперечных колебаний равны. Используем для тензора  $\langle \widetilde{\mathbf{v}} \widetilde{\mathbf{v}} \rangle$  следующее обобщение формулы (4.88):

$$\frac{m}{2} \left\langle \widetilde{\mathbf{v}} \widetilde{\mathbf{v}} \right\rangle = \frac{1}{2} \left\langle \widetilde{\mathbf{A}} \mathbf{F}_1 \right\rangle \approx \Pi' \left\langle \widetilde{\mathbf{A}} \widetilde{\mathbf{A}} \right\rangle + 2\Pi'' \mathbf{A} \mathbf{A} \cdot \left\langle \widetilde{\mathbf{A}} \widetilde{\mathbf{A}} \right\rangle.$$
(4.92)

Для простоты дальнейших выкладок введем функцию  $\hat{\Pi}$ :

$$\hat{\Pi}(A) = \Pi(A^2), \quad \Pi' = \frac{\hat{\Pi}'}{2A}, \quad \Pi'' = \frac{\hat{\Pi}''A - \hat{\Pi}'}{4A^3},$$

$$\Pi''' = \frac{\hat{\Pi}''A^2 - 3\hat{\Pi}''A + 3\hat{\Pi}'}{8A^5}.$$
(4.93)

Здесь штрих обозначает производную по аргументу. Тогда теорема о равном распределении по степеням свободы дает связь дисперсий продольных и поперечных деформаций связи  $\langle \alpha^2 \rangle$  и  $\langle \beta^2 \rangle$ :

$$\frac{m}{2} \left\langle (\widetilde{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{e})^2 \right\rangle = \frac{m}{2} \left\langle (\widetilde{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{n})^2 \right\rangle \implies \hat{\Pi}'' \left\langle \alpha^2 \right\rangle = \frac{\Pi'}{A} \left\langle \beta^2 \right\rangle.$$
(4.94)

Коэффициенты  $\hat{\Pi}'', \hat{\Pi}'/A$  равны продольной и поперечной жесткостям цепочки. Отметим, что при малых деформациях  $\hat{\Pi}'' > \hat{\Pi}'/A$ . Следовательно, в таком случае дисперсия поперечных деформаций  $\langle \beta^2 \rangle$  больше дисперсии продольных деформаций  $\langle \alpha^2 \rangle$ . Данный факт используется далее для вывода нелинейных уравнений состояния.

Исключая  $\langle \alpha^2 \rangle$  и  $\langle \beta^2 \rangle$  из системы уравнений (4.91) с использованием соотношений (4.93), (4.94), получим уравнение состояния в форме Ми-Грюнайзена:

$$\sigma = \sigma_0 - \frac{\Gamma(A)}{A} U_T, \qquad \Gamma = \frac{\Gamma_l + \Gamma_{tr}}{2}, \qquad \Gamma_l = -\frac{\hat{\Pi}''A}{2\hat{\Pi}'},$$

$$\Gamma_{tr} = -\frac{\hat{\Pi}''A - \hat{\Pi}'}{2\hat{\Pi}'},$$
(4.95)

Параметр Грюнайзена  $\Gamma$  имеет две составляющие  $\Gamma_l$ ,  $\Gamma_{tr}$ , соответствующие вкладам продольных и поперечных колебаний соответственно. Вклад продольных колебаний связан с нелинейностью межчастичных взаимодействий  $\Gamma_l$  и обращается в ноль в случае гармонического кристалла ( $\hat{\Pi}''' = 0$ ). Наоборот, вклад поперечных колебаний  $\Gamma_{tr}$  обусловлен только геометрической нелинейностью и не зависит от ангармонических свойств потенциала.

Формула (4.95) дает необходимое и достаточное условие для возникновения в системе отрицательного теплового расширения при малых тепловых энергиях:

$$\Gamma < 0 \quad \Leftrightarrow \quad \hat{\Pi}^{\prime\prime\prime} \hat{\Pi}^{\prime} A + \hat{\Pi}^{\prime\prime} \left( \hat{\Pi}^{\prime\prime} A - \hat{\Pi}^{\prime} \right) > 0. \tag{4.96}$$

Для иллюстрации зависимости параметра Грюнайзена от деформации рассмотрим потенциал Леннарда-Джонса:

$$\hat{\Pi}(A) = \mathcal{E}_0\left[\left(\frac{a}{A}\right)^{12} - 2\left(\frac{a}{A}\right)^6\right],\tag{4.97}$$

где  $\mathcal{E}_0$  — энергия связи, a — равновесное расстояние. Зависимость коэффициента Грюнайзена от деформации цепочки, рассчитанная по формуле (4.95), показана на рис. 4.6. Вклад продольных колебаний в давление положителен и стремится к бесконечности при стремлении деформации к критическому значе-



Рис. 4.6: Зависимость коэффициента Грюнайзена о деформации цепочки с взаимодействиями Леннарда-Джонса. Вертикальная линия при  $(A_*-a)/a$  разделяет области положительного и отрицательного теплового расширения.  $A_*$  вычислено по формуле (4.98).

нию  $b = (13/7)^{1/6}a \approx 1.109a$ , соответствующему разрыву связи. Данный факт впервые отмечен в работе [101], посвященной выводу уравнений состояния для одномерной цепочки. Вклад поперечных колебаний в давление отрицателен почти везде, за исключением небольшого интервала  $A \in [1.098a; b]$ . Параметр Грюнайзена нерастянутой цепочки (A = a) стремится к минус бесконечности, т.к.  $\hat{\Pi}'(a) = 0$ . Нулевое тепловое расширение реализуется при  $A = A_*$ :

$$\Gamma(A_*) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \hat{\Pi}^{\prime\prime\prime} \hat{\Pi}^\prime A_* + \hat{\Pi}^{\prime\prime} \left( \hat{\Pi}^{\prime\prime} A_* - \hat{\Pi}^\prime \right) = 0. \tag{4.98}$$

Здесь все производные вычислены при  $A = A_*$ . Для потенциала Леннарда-Джонса  $A_* \approx 1.0286a$ . В параграфе 4.4.4 показано, что в окрестности точки  $A = A_*$  тепловое расширение отрицательно при малых тепловых энергиях и положительно при больших тепловых энергиях.

Таким образом, при малых тепловых энергиях в зависимости от деформации цепочка может демонстрировать положительное, нулевое или отрицательное тепловое расширение. При двух значениях деформации коэффициент Грюнайзена стремится к плюс/минус бесконечности. Определена деформация, при которой коэффициент Грюнайзена обращается в ноль. Во всех перечисленных случаях квазигармоническое приближение и уравнение Ми-Грюнайзена недостаточны. Более точные уравнения состояния выводятся в следующих параграфах.

#### 4.4.3 Нелинейное тепловое расширение

Рассмотрим тепловое расширение при малых деформациях цепочки. В таком случае поперечные деформации связей больше продольных, т.е.  $\langle \alpha^2 \rangle \ll \langle \beta^2 \rangle$  (см. формулу (4.94)). Связь данных параметров дана теоремой о равном распределении. Разложение уравнения (4.92) с сохранением слагаемых до 4 порядка включительно дает

$$\left(\Pi' + 2\Pi''A^2\right)\left\langle\alpha^2\right\rangle = \Pi'\left\langle\beta^2\right\rangle + \Pi''A\left\langle\alpha\beta^2\right\rangle + \Pi''\left\langle\beta^4\right\rangle.$$
(4.99)

Здесь величины  $\langle \alpha^3 \rangle$ ,  $\langle \alpha^2 \beta^2 \rangle$ ,  $\langle \alpha^4 \rangle$  отброшены в силу преобладания поперечных колебаний. Отметим, что в данном случае важно рассматривать ковариацию между поперечными и продольными деформациями связи  $\langle \alpha \beta^2 \rangle$ . Аналогичное разложение проводится для теплового напряжения  $\sigma_T$  и тепловой энергии  $U_T$ :

$$\sigma_{T} = 2 \left( 3\Pi'' + 2\Pi'''A^{2} \right) A \left\langle \alpha^{2} \right\rangle + 2\Pi''A \left\langle \beta^{2} \right\rangle +$$

$$+ 2 \left( \Pi'' + 2\Pi'''A^{2} \right) \left\langle \alpha\beta^{2} \right\rangle + \Pi'''A \left\langle \beta^{4} \right\rangle,$$

$$U_{T} = 2 \left( \Pi' + 2\Pi''A^{2} \right) \left\langle \alpha^{2} \right\rangle + 2\Pi' \left\langle \beta^{2} \right\rangle + 5\Pi''A \left\langle \alpha\beta^{2} \right\rangle + \frac{3}{2}\Pi'' \left\langle \beta^{4} \right\rangle.$$

$$(4.100)$$

Формула (4.100) показывает, что тепловое напряжение и тепловая энергия зависят от параметров  $\langle \alpha^2 \rangle$ ,  $\langle \beta^2 \rangle$ ,  $\langle \alpha \beta^2 \rangle$ ,  $\langle \beta^4 \rangle$ . Единственное соотношение между данными параметрами задано формулой (4.99). Следовательно, для получения уравнения состояния в явном виде требуются два дополнительных уравнения. Постулируются следующие соотношения:

$$\left\langle \beta^4 \right\rangle = \lambda \left\langle \beta^2 \right\rangle^2, \qquad A \left\langle \alpha \beta^2 \right\rangle = \mu \left\langle \beta^2 \right\rangle^2$$
(4.101)

Параметр  $\lambda$  можно оценить следующим образом. Предположим, что  $\beta$  является нормально распределенной случайной величиной с дисперсией  $\langle \beta^2 \rangle$ . Тогда  $\langle \beta^4 \rangle$  вычисляется так:

$$\left\langle \beta^{4} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi \left\langle \beta^{2} \right\rangle}} \int_{-\infty}^{\infty} \beta^{4} \exp\left(-\frac{\beta^{2}}{2\left\langle \beta^{2} \right\rangle}\right) = 3\left\langle \beta^{2} \right\rangle^{2}.$$
 (4.102)

Следовательно, в случае нормального распределения  $\lambda = 3$ . Численное моделирование при различных значениях деформации цепочки с взаимодействиями Леннарда-Джонса показывает, что  $\lambda \in [2.89; 3]$ ,  $\mu \in [-1; -0.92]$ . Далее будем считать  $\lambda$  и  $\mu$  константами.

Подставляя выражения (4.101) в систему (4.100) и исключая  $\langle \beta^2 \rangle$ , получим следующее определяющее соотношение:

$$\sigma_T = -\frac{B_2}{B_4} U_T - \frac{(B_2 B_3 - B_1 B_4) \left(B_3 - \sqrt{B_3^2 + 4B_4 U_T}\right)}{2B_4^2}, \qquad (4.103)$$

$$B_{1} = -\frac{2}{A} \left( \Pi'' A^{2} - \Gamma_{l} \Pi' \right), \quad B_{3} = 4\Pi', \quad B_{4} = \frac{7}{2} (\lambda + 2\mu) \Pi'',$$

$$B_{2} = -\frac{2}{A} (\mu - \Gamma_{l} (\lambda + \mu)) \Pi'' - (\lambda + 4\mu) \Pi''' A.$$
(4.104)

В отличие от уравнения Ми-Грюнайзена, зависимость напряжения от тепловой энергии, заданная уравнением (4.103) — нелинейная.

Для того, чтобы продемонстрировать важность учета нелинейности в уравнении (4.103), разложим его в ряд по тепловой энергии  $U_T$ . Разложения для случаев растянутой цепочки (A > a), нерастянутой цепочки (A = a) и деформации, соответствующей нулевому параметру Грюнайзена  $A = A_*$ , имеют вид:

$$\sigma_T \approx -\frac{\Gamma(A)}{A} U_T - \frac{B_2 A - \Gamma(A) B_4}{16 \Pi'^2 A} U_T^2, \quad A > a,$$
(4.105)

$$\sigma_T \approx 2 \left( \frac{2\Pi''(a)a^2}{7(\lambda + 2\mu)} \right)^{\frac{1}{2}} \sqrt{U_T}, \quad A = a, \tag{4.106}$$

$$\sigma_T \approx -\frac{B_2}{16\Pi'^2} U_T^2, \quad A = A_*.$$
 (4.107)

Из формул (4.106), (4.107) видно, что цепочка демонстрирует существенно нелинейное тепловое расширение при A = a и  $A = A_*$ . В таких случаях линейное приближение функции  $\sigma_T(U_T)$ , задаваемое уравнением Ми-Грюнайзена, может давать существенную ошибку. Уравнение (4.106) также позволяет ответить на вопрос, почему коэффициент Грюнайзена нерастянутой цепочки стремится к бесконечности. В таком случае зависимость  $\sigma_T(U_T)$  имеет корневую асимптотику при малых  $U_T$ . Следовательно, коэффициент Грюнайзена, характеризующий наклон данной зависимости при  $U_T = 0$ , стремится к бесконечности. Отметим, что правая часть уравнения (4.106) не зависит от ангармонических свойств потенциала  $\Pi$ . Поэтому можно сделать вывод, что существенно нелинейное тепловое расширение нерастянутой цепочки обусловлено геометрической нелинейностью поперечных колебаний, а не ангармоничностью потенциала.

В соответствии с формулой (4.105), нелинейность зависимости  $\sigma_T(U_T)$  также существенна при малых деформациях, т.к. в данном случае квадратичное слагаемое с коэффициентом  $1/\Pi'^2$  в формуле (4.105) становится большим. Более того, при некоторых значениях  $A \in (a; A_*)$  квадратичное слагаемое приводит к немонотонному тепловому расширению, отрицательному при малых тепловых энергиях и положительному при больших тепловых энергиях (см. рис. 4.9).

## 4.4.4 Пример. Тепловое расширение квазиодномерной цепочки Леннарда-Джонса

В настоящем параграфе проводится сравнение предсказаний нелинейного уравнения состояния (4.103) с результатами молекулярно-динамического моделирования. Рассматривается цепочка Леннарда-Джонса, содержащая  $10^3$  частиц, движущихся в плоскости. В направлении цепочки используются периодические граничные условия. Рассматриваются только взаимодействия ближайших соседей. В начальный момент времени частицы находятся на равных расстояниях и имеют случайные начальные скорости, равномерно распределенные в круге. Уравнения движения частиц решаются численно с использованием симлектического метода Верле [205] с шагом интегрирования  $0.02\tau_*$ , где  $\tau_*$  — период колебаний одной частицы на пружинке с жесткостью, равной жесткости связи. В процессе моделирования тепловое давление и тепловая энергия вычисляются по определениям (4.86), (4.87), где используется осреднение по  $10^6$  шагам интегрирования. Дополнительно проводится осреднение по 15 реализациям с различными начальными условиями.

Зависимости теплового давления от тепловой энергии для недеформированной цепочки, вычисленные при моделировании и с использованием нелинейного уравнения состояния (4.103) (для  $\lambda = 2.99$ ,  $\mu = -0.93$ ), показаны на рис. 4.7. Каждая точка на графике соответствует среднему по 15 реализациям с различными начальными условиями. Максимальное значение тепловой энергии, приведенное на графике 4.7, соответствует разрыву цепочки. Очевидно, зависимость теплового давления от тепловой энергии в рассматриваемом случае не может быть описана уравнением Грюнайзена (4.95). Наоборот, нелинейное уравнение состояния (4.103) корректно описывает корневую асимптотику  $\sigma_T(U_T)$ при малых тепловых энергиях.

Зависимости теплового напряжения от тепловой энергии для цепочки, растянутой на 0.1% и 1%, показаны на рис. 4.8. Уравнение Ми-Грюнайзена (4.95)



Рис. 4.7: Зависимости теплового давления ( $p_T = -\sigma_T$ ) от тепловой энергии для нерастянутой цепочки Леннарда-Джонса. Разброс результатов порядка размера точки на графике.

дает правильный наклон зависимости  $\sigma_T(U_T)$  при  $U_T = 0$ . Однако при конечных тепловых энергиях оно имеет значительную погрешность, т.к. квадратичные слагаемые в формуле (4.105) становятся существенными. Например, максимальная ошибка уравнения Ми-Грюнайзена при A = 1.01a составляет более 200%. Для A = 1.001a ошибка еще значительнее. В то же время, нелинейное уравнение состояния (4.103) воспроизводит результаты моделирования во всем диапазоне деформаций энергий. При этом максимальная ошибка составляет около 30%.

Формула (4.98) показывает, что коэффициент Грюнайзена цепочки Леннарда-Джонса равен нулю при  $A_* \approx 1.0286a$ . Рассмотрим поведение цепочки в окрестности данной точки более подробно. Зависимости теплового напряжения от тепловой энергии для A = 1.028a и A = 1.0286a показаны на рисунках 4.9. Для A = 1.0286a тепловое расширение практически отсутствует при  $U_T \rightarrow 0$ . При конечных тепловых энергиях наблюдается положительное тепловое расширение. Асимптотическое поведение при малых тепловых энергиях описывается уравнением (4.107), т.е. тепловое напряжение пропорционально квадрату тепловой энергии. Следовательно, коэффициент теплового расшире-



Рис. 4.8: Зависимости теплового давления ( $p_T = -\sigma_T$ ) от тепловой энергии для цепочки, растянутой на 0.1% (слева) и 1% (справа). Сплошная линия — определяющее соотношение (4.103), пунктир — уравнение Грюнайзена, точки — результаты моделирования. Стандартная ошибка среднего порядка размера точки на графике.

ния стремится к нулю при стремлении к нулю тепловой энергии. Похожий эффект часто наблюдается в квантовых системах.

Для A = 1.028a зависимость  $\sigma_T(U_T)$  немонотонна. Следовательно коэффициент теплового расширения меньше нуля при малых тепловых энергиях и больше нуля при достаточно больших тепловых энергиях. Данный факт качественно описывается уравнением состояния (4.103) и не описывается уравнением Ми-Грюнайзена (4.95). Количественное отличие может быть связано с тем, что уравнение (4.103) выведено для случая малых деформаций.

Дальнейшее увеличение деформации цепочки приводит к уменьшению тепловой энергии, при которой происходит разрыв цепочки. Зависимость теплового давления от тепловой энергии для деформации равной 4% показана на рис. 4.10. При этом с достаточной точностью выполняется уравнение Ми-Грюнайзена.

Отметим также, что при всех деформациях второй коэффициент в разложениях (4.105) функции  $\sigma_T(U_T)$  по  $U_T$  больше нуля. Поэтому уравнение Ми-Грюнайзена дает оценку снизу для давления (см. например, рис. 4.8, 4.9, 4.10). В трехмерных кристаллах наблюдается обратный эффект [243] — уравнение



Рис. 4.9: Зависимость теплового давления от тепловой энергии для цепочки Леннарда-Джонса, растянутой на 2.8% (слева) и 2.86% (справа). Сплошная линия — определяющее соотношение (4.103), пунктир — уравнение Грюнайзена, точки — результаты моделирования.



Рис. 4.10: Зависимость теплового давления от тепловой энергии для цепочки Леннарда-Джонса, растянутой на 4%. Сплошная линия — определяющее соотношение (4.103), пунктир — уравнение Грюнайзена, точки — результаты моделирования.

Ми-Грюнайзена дает оценку сверху для давления. Также отметим, что в трехмерном случае нелинейность зависимости  $\sigma_T(U_T)$  существенно слабее [243].

#### 4.4.5 Результаты параграфа 4.4

В настоящем параграфе получены линейные и нелинейные определяющие соотношения, описывающие тепловое расширение квазиодномерной цепочки. Показано, что для цепочки с взаимодействиями, описываемыми потенциалом типа Леннарда-Джонса, коэффициент теплового расширения может принимать как положительные, так и отрицательные значения в зависимости от деформации. При малых деформациях цепочки зависимость напряжений от тепловой энергии становится сильно нелинейной. В частности, при некоторых значениях деформации данная зависимость немонотонна. Данный эффект не описывается определяющими соотношениями Ми-Грюнайзена и Дюамеля-Неймана.

Выведено нелинейное определяющее соотношение, связывающее температурные напряжения с тепловой энергией и деформацией цепочки. В отличие от известных определяющих соотношений оно качественно правильно описывает поведение цепочки в широком диапазоне температур и деформаций. В частности, показано, что при отсутствии натяжения зависимость напряжений от тепловой энергии имеет корневую асимптотику. При деформации, соответствующей нулевому коэффициенту теплового расширения, напряжения пропорциональны квадрату тепловой энергии.

Приведенные результаты показывают, что зависимость температурных напряжений от тепловой энергии становится существенно нелинейной вблизи неустойчивости цепочки (например, при отсутствии деформации). В частности, сильно нелинейное тепловое расширение может наблюдаться в нанопроволоках и графене вблизи потери устойчивости.

### 4.5 Результаты главы 4

В настоящем параграфе развит подход к получению определяющих соотношений, связывающих в адиабатическом приближении давление, объем и тепловую энергию кристаллических твердых тел с парными силовыми взаимодействиями. Полученные определяющие соотношения позволяют рассчитывать поля термоупругих напряжений в кристаллических твердых телах. В качестве примера рассмотрены квазиодномерная цепочка, а также двумерные и трехмерные кристаллы с парными силовыми взаимодействиями. Для квазиодномерной цепочки исследована связь тепловой энергии и возникающего в результате теплового расширения/сжатия давления при различных значениях силы натяжения. Получены соответствующие определяющие соотношения. Выведена зависимость параметра Грюнайзена, характеризующего наклон зависимости теплового давления от тепловой энергии в нуле, от натяжения цепочки. Показано, что для потенциалов типа Ланнарда-Джонса параметр Грюнайзена квазиодномерной цепочки меняется в интервале от минус бесконечности (для нерастянутой цепочки) до плюс бесконечности (вблизи максимальной деформации). Такое поведение объясняется тем, что в слабо растянутой цепочке зависимость давления от тепловой энергии становится существенно нелинейной. Более того, при некоторых деформациях цепочки данная зависимость может стать немонотонной. В такой ситуации уравнение Ми-Грюнайзена может привести к существенным ошибкам. Выведено нелинейное определяющее соотношение, связывающее давление и тепловую энергию. Данное уравнение качественно описывает поведение цепочки при всех значениях деформации и не слишком больших тепловых энергиях. Уравнение показывает, в частности, что для нерастянутой цепочки зависимость давления от тепловой энергии имеет корневую асимптотику в нуле. Вблизи деформации, соответствующей нулевому коэффициенту Грюнайзена, тепловое давление пропорционально квадрату тепловой энергии. Следовательно, при малых тепловых энергиях коэффициент теплового расширения, пропорциональный коэффициенту Грюнайзена, стремится к нулю. Схожее поведение обычно наблюдается в квантовых системах. В классических системах коэффициент теплового расширения при нулевой температуре, как правило, отличен от нуля. Полученное определяющее уравнение также показывает, что

при определенной деформации цепочки тепловое расширение может быть немонотонным (отрицательным при малых тепловых энергиях и положительным при больших). Аналогичное поведение также наблюдается, например, в численных экспериментах для графена [216] и гибридных материалов [44].

Для двумерных и трехмерных кристаллов проведено разложение тензора напряжений и тепловой энергии в ряд по малому параметру, характеризующему деформации связей, вызванные тепловым движением. Получены выражения, связывающие коэффициент Грюнайзена и коэффициент теплового расширения с параметрами потенциала взаимодействия. С использованием данного выражения выведено условие, при котором тепловое расширение становится отрицательным. Показано, что для того чтобы тепловое расширение было отрицательным, достаточно геометрической нелинейности колебаний частиц. В частности, кристалл с физически линейными взаимодействиями в двумерном и трехмерном случае демонстрирует отрицательное тепловое расширение.

Результаты, полученные в данной главе, опубликованы в работах [105, 108, 112, 111, 119].

# Заключение

Сформулируем 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 решетки 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. Развит подход 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. Развит подход к континуальному описанию переноса энергии в кристаллических твердых телах с произвольной сложной решеткой в линейном при-

ближении. 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. Развит подход 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. Развит подход 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.

# Литература

- Abramyan, A.K., Bessonov, N.M., Mirantsev, L.V., Reinberg, N.A. Influence of liquid environment and bounding wall structure on fluid flow through carbon nanotubes // Physics Letters A, Vol. 379, pp. 1274–1282, 2015.
- [2] Allen, M.P., Tildesley, D.J., Computer Simulation of Liquids. Clarendon Press, Oxford, 1987, p. 385.
- [3] Anisimov, S.I., Zhakhovskii, V.V., Fortov, V.E. Shock wave structure in simple liquids // Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters, Vol. 65, Iss.9. pp. 722–727, 1997.
- [4] Anufriev, R., Gluchko, S., Volz, S., Nomura, M. Quasi-ballistic heat conduction due to levy phonon flights in silicon nanowires // ACS Nano, Vol. 12(12), pp. 11928–11935, 2018.
- [5] Barton, M.A., Stacey, F.D. The Gruneisen parameter at high pressure: a molecular dynamical study // Physics of the Earth and Planetary Interiors, Vol. 39, pp. 167–177, 1985.
- [6] Babenkov, M.B., Krivtsov, A.M., Tsvetkov, D.V. Energy oscillations in 1D harmonic crystal on elastic foundation // Physical Mesomechanics, Vol. 19, No. 1, pp. 60-67, 2016.
- [7] Balandin, A.A. Thermal properties of graphene and nanostructured carbon materials // Nature Materials, Vol. 10, 2011.

- [8] Barrera, G.D., Bruno, J.A.O., Barron, T.H.K., Allan, N.L. Negative thermal expansion // Journal of Physics: Condensed Matter, Vol. 17, pp. R217–R252, 2005.
- [9] Berinskii, I.E., Kuzkin, V.A. Equilibration of energies in a two-dimensional harmonic graphene lattice // Philosophical Transactions of the Royal Society A, Vol. 378, p. 2162, 2019.
- [10] Bonetto, F. Lebowitz, J.L., Lukkarinen, J. Fourier's law for a harmonic crystal with self-consistent stochastic reservoirs // Journal of Statistical Physics, Vol. No. 116, p. 783, 2004.
- [11] Barani, E., Lobzenko, I.P., Korznikova, E.A., Soboleva, E.G., Dmitriev, S.V., Zhou, K., Marjaneh, A.M. Transverse discrete breathers in unstrained graphene // European Physics Journal B, Vol. 90, No. 3, p. 1, 2017.
- [12] Benettin, G., Vecchio, G. Lo, Tenenbaum, A. Stochastic transition in twodimensional Lennard-Jones systems // Physical Review A, Vol. 22, 1709, 1980.
- [13] Berinskii, I.E., Krivtsov, A.M., Linear oscillations of suspended graphene. In: Altenbach H., Mikhasev G. (eds) Shell and Membrane Theories in Mechanics and Biology. Advanced Structured Materials, vol 45. Springer, 2014.
- [14] Berman, G.P., Izrailev, F.M. The Fermi-Pasta-Ulam problem: fifty years of progress // Chaos, Vol. 15, p. 015104, 2005.
- [15] Bhatnagar, P.L., Gross, E.P., Krook, M. A model for collision processes in gases.
  I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems // Physical Review, Vol. 94 (3), pp. 511–525, 1954.
- [16] Bonetto, F., Lebowitz, J.L., Rey-Bellet, L. Fourier's law: a challenge to theorists
   // Mathematical Physics, pp. 128–150, 2000.

- [17] Bonnet, R., Neily, S. An anisotropic thin crystal deformed by an inclined dislocation // Philosophical Magazine, Vol. 95, p. 2764, 2015.
- [18] Boldrighini, C., Pellegrinotti, A., Triolo, L. Convergence to stationary states for infinite harmonic systems // Journal of Statistical Physics, Vol. 30, No. 1, pp. 123–155, 1983.
- [19] Cahill, D.G., Ford, W.K., Goodson, K.E., Mahan, G.D. Majumdar, A., Maris, H.J., Merlin, R., Phillpot, S.R. Nanoscale thermal transport // Journal of Applied Physics, Vol. 93, 793, 2003.
- [20] Candy, J., Rozmus, W., A symplectic integration algorithm for separable Hamiltonian functions // Journal of Computational Physics, Vol. 92, No. 1, pp. 230–256, 1991.
- [21] Casas-Vazquez, J., Jou, D. Temperature in non-equilibrium states: a review of open problems and current proposals // Reports on Progress in Physics, Vol. 66, pp. 1937–2023, 2003.
- [22] Casher, A., Lebowitz, J.L. Heat flow in regular and disordered harmonic chains // Journal of Mathematical Physics, Vol. 12, p. 1701, 1971.
- [23] Cattaneo, C. Sur une Forme de l'equation de la Chaleur Eliminant le Paradoxe d'une Propagation Instantanee' // Comptes rendus de l'Academie des sciences, Vol. 247, 431, 1958.
- [24] Chen, G. Ballistic-diffusive heat conduction equations // Physical Review Letters, Vol. 85, pp. 2297–2300, 2001.
- [25] Chang, C.W., Okawa, D., Garcia, H., Majumdar, A., Zettl, A. Breakdown of Fourier's law in nanotube thermal conductors // Physical Review Letters, Vol. 101, p. 075903, 2008.

- [26] Chang, C.W. in: Thermal transport in low dimensions, Lecture Notes in Physics, Vol. 921, pp. 305-338, 2016.
- [27] Chandrasekharaiah, D.S. Hyperbolic thermoelasticity: a review of recent literature // Applied Mechanics Review, Vol. 39, pp. 355–376, 1986.
- [28] Das, S.G., Dhar, A., Narayan, O. Heat conduction in the  $\alpha \beta$  Fermi-Pasta-Ulam chain // Journal of Statistical Physics, Vol. 154 (1-2), pp. 204-213, 2014.
- [29] Das, S.G., Dhar, A., Saito, K., Mendl, C.B., Spohn, H. Numerical test of hydrodynamic fluctuation theory in the Fermi-Pasta-Ulam chain // Physical Review E, Vol. 90 (1), p. 012124, 2014.
- [30] Dhar A., Heat transport in low-dimensional systems // Advances in Physics, pp. 457-537, 2008.
- [31] Dhar, A., Saito, K. in: Thermal transport in low dimensions, Lecture Notes in Physics, Vol. 921, pp. 305-338, 2016.
- [32] Dove, M.T. Introduction to lattice dynamics. Cambridge University Press, London, 1993.
- [33] Dobrushin, R.L., Pellegrinotti, A., Suhov, Yu.M., Triolo, L. One-dimensional harmonic lattice caricature of hydrodynamics // Journal of Statistical Physics, Vol. 43, 3/4, 1986.
- [34] Dudnikova, T.V., Komech, A.I., Spohn, H. On the convergence to statistical equilibrium for harmonic crystals // Journal of Mathematical Physics, Vol. 44, p. 2596, 2003.
- [35] Dudnikova, T.V., Komech, A.I. On the convergence to a statistical equilibrium in the crystal coupled to a scalar field // Russian Journal of Mathematical Physics, Vol. 12 (3), pp. 301–325, 2005.
- [36] Dugdale, J.S., MacDonald, D.K.C. The thermal expansion of solids // Physical Review, Vol. 89, No. 4, p. 832, 1953.
- [37] Ekneligoda, T.C., Zimmerman, R.W. Compressibility of two-dimensional pores having n-fold axes of symmetry // Proceedings Royal Society A, Vol. 462, p.1933, 2006.
- [38] Ekneligoda, T.C., Zimmerman, R.W. Shear compliance of two-dimensional pores possessing N-fold axis of rotational symmetry // Proceedings Royal Society A, Vol. 464 p. 759, 2008.
- [39] Eremeyev, V.A. On effective properties of materials at the nano-and microscales considering surface effects // Acta Mechanica, Vol. 227(1), pp. 29–42, 2016.
- [40] Eshelby, J.D. Distortion of a crystal by point imperfections // Journal of Applied Physics, Vol. 25, p.255, 1954.
- [41] Eshelby, J.D. The continuum theory of lattice defects // Solid State Physics, Vol. 3, p. 79, 1956.
- [42] Eshelby, J.D. The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems // Proceedings Royal Society A, Vol. 241, p.376, 1957.
- [43] Evans, J.S.O. Negative thermal expansion materials // Dalton Transactions, pp. 3317–3326, 1999.
- [44] Fang, H., Dove, M.T., Phillips, A.E. Common origin of negative thermal expansion and other exotic properties in ceramic and hybrid materials// Physical Review B, Vol. 89, p. 214103, 2014.
- [45] Fang, H., Dove, M.T. Pressure-induced softening as a common feature of framework structures with negative thermal expansion // Physical Review B, Vol. 87, p. 214109, 2013.

- [46] Fedorov, F.I. Theory of elastic waves in crystals. Plenum Press, New York, 1968.
- [47] Fedoryuk, M.V. The stationary phase method and pseudodifferential operators// Russian Mathematical Survey, Vol. 6(1), pp. 65–115, 1971.
- [48] Fermi, E., Pasta, J., Ulam, S. Studies of nonlinear problems. Document LA-1940. Los Alamos National Laboratory (1955).
- [49] Foreman, A.J.E. Elastic relaxation at a vacancy in solid argon // Philosophical Magazine, Vol. 8, No. 91, pp. 1211–1217, 1963.
- [50] Freitas, N., Paz, J.P. Analytic solution for heat flow through a general harmonic network // Physical Review E, Vol. 90, p. 042128, 2014.
- [51] Frenkel, J.I. Wave Mechanics. Elementary Theory. Clarendon Press, Oxford. 1932.
- [52] Flocken, J.W. Modified lattice-statics approach to point-defect calculations // Physical Review B, Vol. 6(4), p. 1176, 1972.
- [53] Flocken, J.W., Hardy, J.R. Application of the method of lattice statics to interstitial Cu atoms in Cu // Physical Review, Vol. 175(3), p. 919, 1968.
- [54] Flocken, J.W., Hardy, J.R. Application of the method of lattice statics to vacancies in Na, K, Rb, and Cs // Physical Review, Vol. 177(3), p. 1054, 1969.
- [55] Flocken, J.W., Hardy, J.R. Asymptotic lattice displacements about point defects in cubic metals // Physical Review B, Vol. 1, No. 6, p. 2447, 1970.
- [56] The Fermi-Pasta-Ulam Problem: A Status Report, edited by G. Gallavotti, Lecture Notes in Physics (Springer, Berlin, Heidelberg, 2008), Vol. 728.
- [57] Gavrilov, S.N., Krivtsov, A.M., Tsvetkov, D.V. Heat transfer in a onedimensional harmonic crystal in a viscous environment subjected to an external

heat supply // Continuum Mechanics Thermodynamics, Vol. 31 (1), pp. 255–272, 2019.

- [58] Gavrilov, S.N., Krivtsov, A.M., 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 // Continuum Mechanics Thermodynamics, Vol. 32(1), pp. 41–61, 2020.
- [59] Gao, C., Slesarenko, V., Boyce, M.C., Rudykh, S., Li, Y. Instability-induced pattern transformation in soft metamaterial with hexagonal networks for tunable wave propagation // Scientific Reports, Vol. 8, No. 1, p. 11834, 2018.
- [60] Gendelman, O.V., Savin, A.V. Normal heat conductivity of the one-dimensional lattice with periodic potential of nearest-neighbor interaction. Physical review letters, Vol. 84(11), p. 2381, 2000.
- [61] Gendelman, O.V., Savin, A.V. Nonstationary heat conduction in onedimensional chains with conserved momentum // Physical Review E, Vol. 81, p. 020103, 2010.
- [62] Gendelman, O.V., Shvartsman, R., Madar, B., Savin, A.V. Nonstationary heat conduction in one-dimensional models with substrate potential // Physical Review E, Vol. 85(1), p. 011105, 2012.
- [63] Guo, P., Gong, J., Sadasivam, S., Xia, Y., Song, T.-B., Diroll, B.T., Stoumpos, C.C., Ketterson, J.B., Kanatzidis, M.G., Chan, M.K.Y., Darancet, P., Xu, T., Schaller, R.D. Slow thermal equilibration in methylammonium lead iodide revealed by transient mid-infrared spectroscopy // Nature Communications, Vol. 9, p. 2792, 2018.
- [64] Guenneau, S., Movchan, A., Ramakrishna, S. A., Petursson, G. Acoustic metamaterials for sound focusing and confinement // New Journal of Physics, Vol. 9, pp. 399, 2007.

- [65] Grima, J.N., Ellul, B., Gatt, R., Attard, D. Negative thermal expansion from disc, cylindrical, and needle shaped inclusions // Physica Status Solidi B, Vol. 250, No. 10, pp. 2051-2056, 2013.
- [66] Gupta, M.K., Mittal, R., Chaplot, S.L., Rols, S. Phonons, nature of bonding, and their relation to anomalous thermal expansion behavior of M2O (M = Au, Ag, Cu) // Journal of Applied Physics, Vol. 115, p. 093507 2014.
- [67] Harris, L., Lukkarinen, J., Teufel, S., Theil, F. Energy transport by acoustic modes of harmonic lattices // SIAM Journal of Mathematical Analysis, Vol. 40, No. 4, 1392, 2008.
- [68] Hardy, J. R. A theoretical study of point defects in the rocksalt structure substitutional K+ in NaCl //Journal of Physics and Chemistry of Solids, Vol. 15, No. 1-2, pp. 39-49, 1960.
- [69] Hardy, J.R., Bullough, R. Point defect interactions in harmonic cubic lattices
   // Philosophical Magazine, Vol. 15, No. 134, pp. 237–246, 1967.
- [70] Hemmer, P.C. Dynamic and stochastic types of motion in the linear chain. Norges tekniske hoiskole, 1959.
- [71] Heine, V., Welche, P.R.L., Dove, M.T. Geometrical origin and theory of negative thermal expansion in framework structures // Journal of American Ceramic Society, Vol. 82, pp. 1793–802, 1999.
- [72] Holian, B.L., Hoover, W.G., Moran, B., Straub, G.K. Shock-wave structure via nonequilibrium molecular dynamics and Navier-Stokes continuum mechanics // Physical Review A, Vol. 22, p. 2798, 1980.
- [73] Holian, B.L., Mareschal, M. Heat-flow equation motivated by the ideal-gas shock wave // Physical Review E, Vol. 82, p. 026707, 2010.

- [74] Hizhnyakov, V., Klopov, M., Shelkan, A. Transverse intrinsic localized modes in monoatomic chain and in graphene // Physics Letters A, Vol. 380, Is. 9-10, pp. 1075–1081, 2016.
- [75] Hoover, W.G., Hoover, C.G. Hamiltonian thermostats fail to promote heat flow
   // Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulations, Vol. 18, p. 3365, 2013.
- [76] Hoover, W.G., Hoover, C.G., Travis, K.P. Shock-wave compression and Joule-Thomson expansion // Physical Review Letters, Vol. 112, p. 144504, 2014.
- [77] Hoover, W.G. Computational statistical mechanics. Studies in modern thermodynamics. Elsevier Science, p. 314, 1991.
- [78] Hsiao, T.K., Chang, H.K., Liou, S.-C., Chu, M.-W., Lee, S.-C., Chang, C.-W. Observation of room-temperature ballistic thermal conduction persisting over 8.3 μm SiGe nanowires // Nature Nanotechnology, Vol. 8(7), p. 534, 2013.
- [79] Hua, C., Minnich A.J., Transport regimes in quasiballistic heat conduction // Physical Review B, Vol. 89, p. 094302, 2014.
- [80] Huberman, S., Duncan, R.A., Chen, K., Song, B., Chiloyan, V., Ding, Z., Maznev, A.A., Chen, G., Nelson, K.A. Observation of second sound in graphite at temperatures above 100 K // Science, Vol. 364(6438), pp. 375–379, 2019.
- [81] Huerta, M.A., Robertson, M.A. Entropy, information theory, and the approach to equilibrium of coupled harmonic oscillator systems // Journal of Statistical Physics, Vol. 1, 3, pp. 393–414, 1969.
- [82] Huerta, M.A., Robertson, H.S., Nearing, J.C. Exact equilibration of harmonically bound oscillator chains // Journal of Mathematical Physics, Vol. 12, p. 2305, 1971.

- [83] Indeitsev, D.A., Abramyan, A.K., Bessonov, N.M., Mirantsev, L.V. Mathematical model of fluid flow in nanochannels // International Journal of Nanomechanics, Science and Technology, Vol. 1, No. 2, pp. 151–168, 2010.
- [84] Indeitsev, D.A., Naumov, V.N., Semenov, B.N., Belyaev, A.K. Thermoelastic waves in a continuum with complex structure // Journal of Applied Mathematics and Mechanics, Vol. 89, 279, 2009.
- [85] Inogamov, N.A., Petrov, Yu.V., Zhakhovsky, V.V., Khokhlov, V.A., Demaske, B.J., Ashitkov, S.I., Khishchenko, K.V., Migdal, K.P., Agranat, M.B., Anisimov, S.I., Fortov, V.E., Oleynik, I.I., Two-temperature thermodynamic and kinetic properties of transition metals irradiated by femtosecond lasers // AIP Conference Proceedings, Vol. 1464, 593, 2012.
- [86] Irvine, R.D., Stacey, F.D. Pressure dependence of the thermal gruneisen parameter, with application to the Earth's lower mantle and outer core // Physics of Earth and Planetary Interiors, Vol. 11, 157, 1975.
- [87] Johnson, J.A., Maznev, A.A., Cuffe, J., Eliason, J.K., Minnich, A.J., Kehoe, T., Sotomayor Torres C.M., Chen, G., Nelson K.A. Direct measurement of roomtemperature nondiffusive thermal transport over micron distances in a silicon membrane // Physical Review Letters, Vol. 110, p. 025901, 2013.
- [88] Kanzaki, H. (1957). Point defects in face-centred cubic lattice—I distortion around defects // Journal of Physics and Chemistry of Solids, Vol. 2(1), p. 24–36, 1957.
- [89] Kannan, V., Dhar, A., Lebowitz, J.L. Nonequilibrium stationary state of a harmonic crystal with alternating masses // Physical Review E, Vol. 85, 041118, 2012.
- [90] Kato, A., Jou, D. Breaking of equipartition in one-dimensional heat-conducting systems // Physical Review E, Vol. 64, 052201, 2001.

- [91] Klemens, P.G. The thermal conductivity of dielectric solids at low temperatures
   // Proceedings Royal Society A, Vol. 208(1092), pp. 108–133, 1951.
- [92] Kanaun, S.K., Levin, V. Self-Consistent Methods for Composites: Vol. 1: Static Problems, Springer Netherlands, 2007.
- [93] Kachanov, M., Tsukrov I., Shafiro, B. Effective moduli of solids with cavities of various shapes // Applied Mechanics Reviews, 47, p. S151, 1994.
- [94] Kavianpour, S., Yavari, A. Anharmonic analysis of defective crystals with manybody interactions using symmetry reduction // Computational Materials Science, Vol. 44, No. 4, pp. 1296-1306, 2009.
- [95] Klein, G., Prigogine, I. Sur la mecanique statistique des phenomenes irreversibles III // Physica, Vol. 19, 1053, 1953.
- [96] Kim, W.K., Tadmor, E.B. An analytical self-consistent solution for the free energy of a 1D chain of atoms including anharmonic effects // Journal of Statistical Physics, Vol. 148, pp. 951–971, 2012.
- [97] Kittel, C. Introduction to solid state physics // Vol. 8. New York: Wiley, 1976.
- [98] Kosevich, A.M. The crystal lattice: phonons, solitons, dislocations, superlattices. John Wiley & Sons, 2006.
- [99] Krivtsov, A.M. Constitutive equations of the nonlinear crystal lattice // Journal of Applied Mathematics and Mechanics, Vol. 79 (S2), pp. 419 – 420, 1999.
- [100] Krivtsov, A.M., Wiercigroch, M. Molecular dynamics simulation of mechanical properties for polycrystal materials // Materials Physics and Mechanics, Vol. 3 p. 45, 2001.
- [101] Krivtsov, A.M. From nonlinear oscillations to equation of state in simple discrete systems // Chaos, Solitons and Fractals, Vol. 17(1), pp. 79–87, 2003.

- [102] Krivtsov, A.M. Dynamics of energy characteristics in one-dimensional crystal // Proceedings of XXXIV Summer School "Advanced Problems in Mechanics St.-Petersburg, Russia, pp. 261–273, 2007.
- [103] Krivtsov, A.M. The ballistic heat equation for a one-dimensional harmonic crystal. In: Altenbach, H., Belyaev, A., Eremeyev, V.A., Krivtsov, A., Porubov, A.V. (eds.) Dynamical Processes in Generalized Continua and Structures. Springer, Berlin, 2019.
- [104] Krivtsov, A.M., Sokolov, A.A., Müller, W.H., Freidin, A.B. One-dimensional heat conduction and entropy production // Advanced Structured Materials, Vol. 87, pp. 197–213, 2018.
- [105] Krivtsov, A.M., Kuzkin, V.A. Discrete and continuum thermomechanics // Encyclopedia of Continuum Mechanics, Springer-Verlag, 2018.
- [106] Kuzkin, V.A. Interatomic force in systems with multibody interactions// Physical Review E, Vol. 82, p. 016704, 2010.
- [107] Kuzkin, V.A., Krivtsov, A.M. Equivalent thermo-mechanical parameters for perfect crystals. In: IUTAM Symposium on the Vibration Analysis of Structures with Uncertainties, IUTAM Bookseries, Springer, 2011.
- [108] Kuzkin, V.A., Krivtsov, A.M. Nonlinear positive/negative thermal expansion and equations of state of a chain with longitudinal and transverse vibrations // Physica Status Solidi b, Vol. 252, p. 1664, 2015.
- [109] Kuzkin, V.A., Krivtsov, A.M. Fast and slow thermal processes in harmonic scalar lattices // Journal Physics: Condensed Matter, Vol. 29, p. 505401, 2017.
- [110] Kuzkin, V.A., Krivtsov, A.M. Energy transfer to a harmonic chain under kinematic and force loadings: exact and asymptotic solutions // Journal of Micromechanics and Molecular Physics, Vol. 3, Nos. 1 & 2, p. 1850004, 2018.

- [111] Kuzkin, V.A., Krivtsov, A.M., Jones, R.E., Zimmerman, J.A. Material stress representation of equivalent stress tensor for discrete solids // Physical Mesomechanics, Vol. 18 (1), p. 13, 2015.
- [112] Kuzkin, V.A. Comment on "Negative thermal expansion in single-component systems with isotropic interactions" // Journal of Physical Chemistry, Vol. 118(41), pp. 9793 – 9794, 2014.
- [113] Kuzkin, V.A., Kachanov, M. Contact of rough surfaces: Conductance-stiffness connection for contacting transversely isotropic half-spaces // International Journal of Engineering Science, Vol. 97, pp. 1-5, 2015.
- [114] 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 // Philolosphical Magazine, 96 (15), pp. 1538-1555, 2016.
- [115] Kuzkin, V.A. Thermal equilibration in infinite harmonic crystals // Continuum Mechanics and Thermodynamics, Vol. 31, No. 5, pp. 1401–1423, 2019.
- [116] Kuzkin, V.A., Liazhkov, S.D., Equilibration of kinetic temperatures in facecentered cubic lattice // Physical Review E [submitted]
- [117] Kuzkin, V.A. Unsteady ballistic heat transport in harmonic crystals with polyatomic unit cell // Continuum Mechanics and Thermodynamics, Vol. 31, No. 6, pp. 1573-1599, 2019.
- [118] Kuzkin, V.A. On angular momentum balance in particle systems with periodic boundary conditions // Journal of Applied Mathematics and Mechanics, Vol. 95, Is. 11, pp. 1290-1295, 2015.
- [119] Kuzkin, V.A., Krivtsov, A.M. Ballistic resonance and thermalization in Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou chain at finite temperature // Physical Review E, Vol. 101, p. 42209, 2020.

- [120] Kuzkin, V.A., Krivtsov, A.M. Unsteady ballistic heat transport: lattice dynamics and kinetic theory // Acta Mechanica, 2020 [submitted]
- [121] Koh, Y.K., Cahill, D.G., Sun, B. Nonlocal theory for heat transport at high frequencies // Physical Review B, Vol. 90 (20), p. 205412, 2014.
- [122] Korobeynikov, S.N. Nonlinear equations of deformation of atomic lattices // Archives of Mechanics, Vol. 57, No. 6, pp. 435-453, 2005.
- [123] Kosevich, Y.A., Savin, A.V. Confining interparticle potential makes both heat transport and energy diffusion anomalous in one-dimensional phononic systems // Physics Letters A, Vol. 380, p. 3480, 2016.
- [124] Kubo, R. Boltzmann equation in solid state physics. In: Cohen E.G.D., Thirring W. (eds) The Boltzmann Equation. Acta Physica Austriaca (Supplementum X Proceedings of the International Symposium "100 Years Boltzmann Equation" in Vienna 4th–8th September 1972), Vol. 10, 1973. Springer, Vienna.
- [125] Kukushkin, S.A. Evolution processes in multicomponent and multiphase films Author links open overlay panel // Thin Solid Films, Vol. 207, Is. 1–2, pp. 302– 312, 1992.
- [126] Kuksin, A.Yu., Morozov, I.V., Norman, G.E., Stegailov, V.V., Valuev, I.A. Standard of molecular dynamics modelling and simulation of relaxation // Molecular simulation, Vol. 31. pp. 1005–1017, 2005.
- [127] Lakes, R.K., Wojciechowski, W. Negative compressibility, negative Poisson's ratio, and stability // Physica Status Solidi B, Vol .245, No. 3, pp. 545–551, 2008.
- [128] Lanford, O.E., Lebowitz, J.L. Time evolution and ergodic properties of harmonic systems. In: Lecture Notes in Physics, Vol. 38, pp. 144–177. Berlin-Heidelberg-New York : Springer 1975.

- [129] Leibfried, G., Ludwig, W. Theory of anharmonic effects in crystals // Solid state physics, Vol 12. pp. 275-444, 1961.
- [130] Le-Zakharov, A.A., Krivtsov, A.M., Porubov, A.V. Relation between defects and crystalline thermal conduction // Continuum Mechanics and Thermodynamics, Vol. 31, No. 6, pp. 1873–1881, 2019.
- [131] Linn, S.L., Robertson, H.S. Thermal energy transport in harmonic systems // Journal of Physics and Chemistry of Solids, Vol. 45(2), pp. 133–140, 1984.
- [132] Linde, D., Sokolowski-Tinten, K., Bialkowski, J. Laser-solid interaction in the femtosecond time regime // Applied Surface Science, Vol. 109, pp. 1–10, 1997.
- [133] Liu, X., Liang, N. Effective elastic moduli of triangular lattice material with defects //Journal of the Mechanics and Physics of Solids, Vol. 60, No. 10, pp. 1722-1739, 2012.
- [134] Lee, L.W., Dhar, A. Heat conduction in a two-dimensional harmonic crystal with disorder // Physical Review Letters, Vol. 95(9), p. 094302, 2005.
- [135] Lepri, S., Livi, R., Politi, A. Thermal conduction in classical low-dimensional lattices // Physics Reports, Vol. 377, pp. 1–80, 2003.
- [136] Lepri, S., Mejia-Monasterio, C., Politi, A. A stochastic model of anomalous heat transport: analytical solution of the steady state // Journal of Physics A, Vol. 42, No. 2, p. 025001, 2008.
- [137] Lepri, S., Mejia-Monasterio, C., Politi, A. Nonequilibrium dynamics of a stochastic model of anomalous heat transport // Journal of Physics A, Vol. 43, p. 065002, 2010.
- [138] Lind, C. Two decades of negative thermal expansion research: where do we stand? // Materials, Vol. 5, pp. 1125–1154, 2012.

- [139] Loboda, O.S., Krivtsov, A.M, Porubov, A.V., Tsvetkov, D.V. Thermal processes in a one-dimensional crystal with regard for the second coordination sphere // Journal of Applied Mathematics and Mechanics, Vol. 99, Is. 9, p. 13, 2019.
- [140] Lukkarinen, J. Kinetic theory of phonons in weakly anharmonic particle chains.In: Lepri S. (eds) Thermal Transport in Low Dimensions. Lecture Notes in Physics, vol 921. Springer, Cham, 2016.
- [141] Lurie, S.A., Belov, P.A. On the nature of the relaxation time, the Maxwell–Cattaneo and Fourier law in the thermodynamics of a continuous medium, and the scale effects in thermal conductivity // Continuum Mechanics and Thermodynamics, pp. 1–20, 2018.
- [142] Lurie, S.A., Volkov-Bogorodskii, D., Tuchkova, N. Exact solution of Eshelby–Christensen problem in gradient elasticity for composites with spherical inclusions // Acta Mechanica, Vol. 227(1), pp. 127–138, 2016.
- [143] Lurie, S.A., Solyaev, Y.O. Identification of gradient elasticity parameters based on interatomic interaction potentials accounting for modified Lorentz-Berthelot rules // Physical Mesomechanics, Vol. 20, pp. 392–398, 2017.
- [144] Lurie, S.A., Solyaev, Y.O. Identification method of gradient models parameters of inhomogeneous structures based on discrete atomistic simulations // PNRPU Mechanics Bulletin, pp. 68–76, 2018.
- [145] McLachlan, R.I., Atela, P. The accuracy of symplectic integrators // Nonlinearity, Vol. 5, No. 2, p. 541, 1992.
- [146] Mahan, G.D., Claro, F. Nonlocal theory of thermal conductivity // Physical Review B, Vol. 38, p. 1963, 1988.

- [147] Mary, T.A., Evans, J.S.O., Vogt, T., Sleight, A.W. Negative thermal expansion from 0.3 to 1050 Kelvin in ZrW2O8 // Science, Vol. 272, No. 5258, pp. 90–92, 1996.
- [148] Mellet, A., Merino-Aceituno, S. Anomalous energy transport in FPU- $\beta$  chain // Journal of Statistical Physics, Vol. 160, pp. 583–621, 2015.
- [149] Metsue, A., Oudriss, A., Feaugas, X. Thermodynamic versus kinetic origin of SuperAbundant vacancy formation in Ni single crystals // Philosophical Magazine, Vol. 94, p. 3978, 2014.
- [150] Mielke, A. Macroscopic behavior of microscopic oscillations in harmonic lattices via Wigner-Husimi transforms // Archive of Rational Mechanics and Analysis, Vol. 181, p. 401, 2006.
- [151] Migoni, R., Tome, C. N., Smetniansky-De Grande, N., Savino, E.J. Lattice static Green function for an HCP lattice // Physical Review B, Vo. 22, No. 6, p. 2658, 1980.
- [152] Miller, W., Smith, C.W., Mackenzie, D.S. Evans, K.E. Negative thermal expansion: a review // Journal of Material Science, Vol. 44, pp. 5441–5451, 2009.
- [153] Miller, K.M., Heald, P.T. The lattice distortion around a vacancy in FCC metals // Physica Status Solidi b, Vol. 67, No. 2, pp. 569–576, 1975.
- [154] Minnich, A.J., Chen, G., Mansoor, S., Yilbas, B.S. Quasiballistic heat transfer studied using the frequency-dependent Boltzmann transport equation // Physical Review B, Vol. 84, No. 23, p. 235207, 2011.
- [155] Mishuris, G.S., Movchan, A.B., Slepyan, L.I. Localised knife waves in a structured interface // Journal of Mechanics and Physics of Solids, Vol. 57, p. 1958, 2009.

- [156] Murachev, A.S., Krivtsov, A.M., Tsvetkov D.V. Thermal echo in a finite onedimensional harmonic crystal // Journal of Physics: Condensed Mater, Vol. 31, No. 9, 2019.
- [157] Muratikov, K.L., Glazov, A.L., Rose, D.N., Dumar, J.E. Photoacoustic effect in stressed elastic solids // Journal of Applied Physics, Vol. 88, No. 5, pp. 2948– 2955, 2000.
- [158] Muratikov, K.L. Theory of the generation of mechanical vibrations by laser radiation in solids containing internal stresses on the basis of the thermoelastic effect // Technical Physics, Vol. 44, pp. 792–796, 1999.
- [159] Nakazawa, H. On the lattice thermal conduction // Progress in Physics, Vol. 45, 231, 1970.
- [160] Nika, D.L., Balandin, A.A. Two-dimensional phonon transport in graphene // Journal of Physics: Condensed Matter, Vol. 24, p. 233203, 2012.
- [161] Nishiguchi, N., Kawada, Y., Sakuma, E. Thermal conductivity in twodimensional monatomic non-linear lattices // Journal of Physics: Condensed Matter, Vol. 4, p. 10227, 1992.
- [162] Nieves, M.J., Movchan, A.B., Jones, I.S., Mishuris, G.S. Propagation of Slepyan's crack in a non-uniform elastic lattice // Journal of Mechanics and Physics of Solids, Vol. 61, No. 6, p. 1464, 2013.
- [163] Norman, G.E., Stegailov, V.V. Stochastic theory of the classical molecular dynamics method // Mathematical Models and Computer Simulations, Vol. 5, pp. 305–333, 2013.
- [164] Onorato, M., Vozella, L., Proment, D., Lvov, Y.V. Route to thermalization in the a-Fermi-Pasta-Ulam system // Proceedings of the National Academy of Sciences, Vol. 112, pp. 4208–421, 2015.

- [165] Peierls, R. Zur kinetischen theorie der warmeleitung in kristallen // Annals of Physics, Vol. 3, p. 1055, 1929.
- [166] Piazza, F., Lepri, S. Heat wave propagation in a nonlinear chain // Physical Review B, Vol. 79, p. 094306, 2009.
- [167] Pizzagalli, L., Brochard, S., Godet, J., Gérard, C. Mechanical properties of nanostructure in Encyclopedia of Nanotechnology, B. Bhushan, ed., Springer Netherlands, Dordrecht, p.1, 2015.
- [168] Podolskaya, E.A., Krivtsov, A.M., Tsvetkov, D.V. Anomalous heat transfer in one-dimensional diatomic harmonic crystal // Materials Physics and Mechanics, Vol. 40, pp. 172–180, 2018.
- [169] Poletkin, K.V., Gurzadyan, G.G., Shang, J., Kulish, V. Ultrafast heat transfer on nanoscale in thin gold films // Applied Physics B, Vol. 107, p. 137 2012.
- [170] Prigogine, I., Henin, F. On the general theory of the approach to equilibrium.
  i. interacting normal modes // Journal of Mathematical Physics, Vol. 1, p. 349, 1960.
- [171] Pumarol, M.E., Rosamond, M.C., Tovee, P., Petty, M.C., Zeze, D.A., Falko, V., Kolosov, O.V. Direct nanoscale imaging of ballistic and diffusive thermal transport in graphene nanostructures // Nano Letters, Vol. 12, No. 6, 2906, 2012.
- [172] Rattan, S. K., Singh, P., Prakash, S., Singh, J. Strain field due to point defects in metals //Physical Review B, Vol. 47, No. 2, p. 599, 1993.
- [173] Rieder, Z., Lebowitz, J.L., Lieb, E. Properties of a harmonic crystal in a stationary nonequilibrium state // Journal of Mathematical Physics, Vol. 8, 1073, 1967.

- [174] Rogers, J.A., Maznev, A.A., Banet, M.J., Nelson, K.A. Optical generation and characterization of acousticwaves in thin films: fundamentals and applications // Annual Reviews in Material Science, Vol. 30, pp. 117–157, 2000.
- [175] Romano, G., Grossman, J.C. Heat conduction in nanostructured materials predicted by phonon bulk mean free path distribution // Journal of Heat Transfer, Vol. 137, p. 071302-1, 2015.
- [176] Rottger, K., Endriss, A., Ihringer, J., Doyle, S., Kuhs, W.F. Lattice constants and thermal expansion of H2O and D2O ice Ih between 10 and 265 K // Acta Crystallographica, Vol. 50, No. 6, pp. 644-648, 1994.
- [177] Rechtsman, M.C., Stillinger, F.H., Torquato, S. Negative thermal expansion in single-component systems with isotropic interactions // Journal of Physical Chemistry A, Vol. 111, No. 49, pp. 12816-12821, 2007.
- [178] Savin, A.V., Gendelman, O.V. Heat conduction in one-dimensional lattices with on-site potential // Physical Review E, 67(4), p. 041205, 2003.
- [179] Savin, A.V., Zolotarevskiy, V., Gendelman, O.V. Normal heat conductivity in two-dimensional scalar lattices // European Physics Letters, Vol. 113, p. 24003, 2016.
- [180] Savin, A.V., Zolotarevskiy, V., Gendelman, O.V. Heat conduction in diatomic chains with correlated disorder // Physics Letters A, Vol. 381(3), pp. 145–152, 2017.
- [181] 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, Vol. 97, p. 022217, 2018.
- [182] Schrödinger, E. Zur dynamik elastisch gekoppelter punktsysteme // Annalen der Physik, Vol. 44, p. 916, 1914.

- [183] Shilko, E.V., Psakhie, S.G., Schmauder, S., Popov, V.L., Astafurov, S.V., Smolin, A.Y. Overcoming the limitations of distinct element method for multiscale modeling of materials with multimodal internal structure // Computational materials science, Vol. 102, 267–285, 2015.
- [184] Sokolov, A.A., Krivtsov, A.M., Muller, W.H. Localized heat perturbation in harmonic 1D crystals: Solutions for an equation of anomalous heat conduction // Physical Mesomechanics, Vol. 20, No. 3, pp. 305–310, 2017.
- [185] Simon, S.H. The Oxford solid state basics. OUP Oxford, 2013.
- [186] Sinha, S., Goodson, K.E. Review: multiscale thermal modeling in nanoelectronics // International Journal of Multiphysics Computational Engineering, Vol. 3, No. 1, pp. 107–133, 2005.
- [187] Slepyan, L.I.On the energy partition in oscillations and waves // Proceedings of the Royal Society A, Vol. 471, p. 20140838, 2015.
- [188] Spohn, H., Lebowitz, J.L. Stationary non-equilibrium states of infinite harmonic systems // Communications in Mathematical Physics, Vol. 54, p. 97, 1977.
- [189] Spohn, H. The phonon Boltzmann equation, properties and link to weakly anharmonic lattice dynamics // Journal of Statistical Physics, Vol. 124(2-4), pp. 1041-1104, 2006.
- [190] Stacey, F.D. Applications of thermodynamics to fundamental Earth physics // Geophysical Surveys, Vol. 3, No. 2, pp. 175-204, 1977.
- [191] Stacey, F.D. Properties of a harmonic lattice // Physics of the earth and planetary interiors, Vol. 78, No. 1-2, pp. 19–22, 1993.
- [192] Stacey, F.D. Thermodynamics of the Earth // Reports on Progress in Physics, Vol. 73, No. 4, p. 046801, 2010.

- [193] I.E. Tamm, Über die quantentheorie der molekularen lichtzerstreuung in festen körpern. Zeitschrift für Physik, 60(5-6), pp.345-363, 1930.
- [194] Tautz, F.S., Heine, V., Dove, M.T., Chen, X. Rigid unit modes in the molecular dynamics simulation of quartz and the incommensurate phase transition // Physics and Chemistry of Minerals, Vol. 18, pp. 326–336, 1991.
- [195] Tewary, V.K. Green-function method for lattice statics // Advances in Physics, Vol. 22, No. 6, pp. 757–810, 1973.
- [196] Thomson, R., Zhou, S.J. Interfacial crack in a two-dimensional hexagonal lattice //Physical Review B, Vol. 49, No. 1, p. 44, 1994.
- [197] Tsaplin, V.A., Kuzkin, V.A. Temperature oscillations in harmonic triangular lattice with random initial velocities // Letters on Materials, Vol. 8(1), pp. 16–20, 2018.
- [198] Tsaplin, V.A., Kuzkin, V.A., An asymptotic formula for displacement field in triangular lattice with vacancy // Letters on materials, Vol. 7 (4), pp. 341-344, 2017.
- [199] Tsvetkov, D.V., Krivtsov, A.M. Energy distribution in one-dimensional crystal. in: Proceedings of XXIV ICTAM conference, 21-26 August 2016, Montreal, Canada, 2016.
- [200] Tsai, D.H., MacDonald, R.A. Molecular-dynamical study of second sound in a solid excited by a strong heat pulse // Physical Review B, Vol. 14(10), p. 4714, 1976.
- [201] Titulaer, U.M. Ergodic features of harmonic-oscillator systems. III. Asymptotic dynamics of large systems // Physica, Vol. 70, No. 3, 456–474, 1973.
- [202] Tzou, D.Y. Macro- to microscale heat transfer: the lagging behavior, Wiley, 566 p., 2015.

- [203] Uribe, F.J., Velasco, R.M., Garcia-Colin, L.S. Two kinetic temperature description for shock waves // Physical Review E, Vol. 58, p. 3209, 1998.
- [204] Utkin, A.V., Fomin, V.M. Molecular dynamic calculation of the bulk modulus for silicon and silicon carbide // Doklady Physics, Vol. 65, No. 5, pp. 174-177, 2020.
- [205] Verlet, L. Computer experiments on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules // Physical review, Vol. 159(1), p. 98, 1967.
- [206] P. Vernotte, Les paradoxes de la theorie continue de l'equation de la chaleur, Comptes rendus de l'Academie des sciences, Vol. 246, p. 3154, 1958.
- [207] Welche, P.R.L., Heine, V., Dove, M.T. Negative thermal expansion in betaquartz // Physical and Chemistry of Minerals, Vol. 26, pp. 63–77, 1998.
- [208] Wong, R. Asymptotic approximations of integrals. Academic Press, 556 p., 1989.
- [209] Xiong, D. Heat perturbation spreading in the Fermi-Pasta-Ulam system with next-nearest-neighbor coupling: Competition between phonon dispersion and nonlinearity // Physical Review E, Vol. 95 (6), p. 062140, 2017.
- [210] Xiong, D., Zhang, Y., Zhao, H., Heat transport enhanced by optical phonons in one-dimensional anharmonic lattices with alternating bonds // Physical Review E, Vol. 88, p. 052128, 2013.
- [211] Xu, M., Hu, H. A ballistic-diffusive heat conduction model extracted from Boltzmann transport equation // Proceedings of the Royal Society A, Vol. 467, Is. 2131, 2010.
- [212] Xu, X., Pereira, L.F., Wang, Y., Wu, J., Zhang, K., Zhao, X., Bae, S., Bui, C.T., Xie, R., Thong, J.T., Hong, B.H., Loh, K.P., Donadio, D., Li, B., Ozyilmaz,

B. Length-dependent thermal conductivity in suspended single-layer graphene // Nature Communications, Vol. 5, p. 3689, 2014.

- [213] Yang, B., Tewary, V.K. Green's function-based multiscale modeling of defects in a semi-infinite silicon substrate // International journal of solids and structures, Vol. 42, No. 16-17, pp. 4722-4737, 2005.
- [214] Yang, B., Tewary, V.K. Multiscale Green's function for the deflection of graphene lattice // Physical Review B, Vol. 77, No. 24, p. 245442, 2008.
- [215] Yavari, A., Ortiz, M., Bhattacharya, K. A theory of anharmonic lattice statics for analysis of defective crystals // Journal of Elasticity, Vol. 86, No. 1, pp. 41-83, 2007.
- [216] Yoon, D., Son, Y.-W., Cheong, H. Negative thermal expansion coefficient of graphene measured by raman spectroscopy // Nano Letters, Vol. 11, pp. 3227–3231, 2011.
- [217] Zhao, H., Wang, L. Deviation from the Maxwell-Cattaneo law: Role of asymmetric interparticle interactions // Physical Review E, Vol. 92(4), p. 042136, 2015.
- [218] Zakharchenko, K.V., Katsnelson, M.I., Fasolino, A. Finite temperature lattice properties of graphene beyond the quasiharmonic approximation // Physical Review Letters, Vol. 102, p. 046808, 2009.
- [219] Ziman, J.M. Electrons and phonons. The theory of transport phenomena in solids // Oxford University Press, New York, 554 p., 1960.
- [220] Алёхин, В.В., Аннин, Б.Д., Бабичев, А.В., Коробейников, С.Н. Собственные колебания и выпучивание графеновых листов // Известия Российской академии наук. Механика твердого тела, No. 5, с. 34–38, 2013.

- [221] Аннин, Б.Д., Садовская, О.В., Садовский, В.М. Численное моделирование косого соударения пластин в упругопластической постановке // Физическая мезомеханика, Т. 3, No. 4, 2000.
- [222] Аннин, Б.Д., Коробейников, С.Н., Бабичев, А.В. Компьютерное моделирование выпучивания нанотрубки при кручении // Сибирский журнал индустриальной математики, Т. 11, No. 1, с. 3–22, 2008.
- [223] Вильчевская, Е.Н. Тензорная алгебра и тезорный анализ: учеб. пособие. СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 44 с., 2012.
- [224] Гельфанд, И.М., Шилов, Г.Е. Обобщенные функции и действия над ними. Физматгиз, 1959.
- [225] Головнев, И.Ф., Головнева, Е.И., Фомин, В.М. Молекулярно-динамическое исследование влияния границы раздела на разрушение гетероструктуры при одноосном растяжении // Физическая мезомеханика, Т. 236 No. 4, 2020.
- [226] Головнев, И.Ф., Головнева, Е.И., Конев, А.А. Фомин, В.М. Физическая мезомеханика и молекулярно-динамическое моделирование // Физическая мезомеханика, Т. 1, No. 2, 1998.
- [227] Головнева, Е.И., Головнев, И.Ф., Фомин, В.М. Моделирование квазистатических процессов в кристаллах методом молекулярной динамики // Физическая мезомеханика, Т. 6, No. 6, 2003.
- [228] Гольдштейн, Р.В., Морозов, Н.Ф. Механика деформирования и разрушения наноматериалов и нанотехнологии // Физическая мезомеханика, Т. 10, No. 5, 2007.
- [229] Григолюк, Э.И., Фильштинский, Л.А. Перфорированные пластины и оболочки. Изд-во Наука, Глав. ред. физико-математической лит-ры, 1970.

- [230] Гузев, М.А. Точная формула для температуры одномерного кристалла // Дальневосточный математический журнал, No. 18:1, с. 39–47, 2018.
- [231] Еремеев, В.А., Иванова, Е.А., Морозов, Н.Ф., Соловьев, А.Н. Об определении собственных частот нанообъектов // Доклады Академии наук, Т. 406, No. 6, с. 756–759, 2006.
- [232] Иванова, Е.А., Кривцов, А.М., Морозов, Н.Ф. Особенности расчета изгибной жесткости нанокристаллов // Доклады Академии наук, Т. 385, No. 4, с. 494–496, 2002.
- [233] Иванова, Е.А., Кривцов, А.М., Морозов, Н.Ф., Фирсова, А.Д. Описание кристаллической упаковки частиц с учетом моментных взаимодействий // Известия РАН. Механика твердого тела, No. 4, с. 110–127, 2003.
- [234] Индейцев, Д.А., Осипова, Е.В. Двухтемпературная модель оптического возбуждения звука в проводиниках // Доклады академии наук, Т. 473, No. 2, 2017.
- [235] Индейцев, Д.А., Сергеев, А.Д. Корреляция между свойствами частот и форм свободных колебаний твердотельной цепочки с моментными связями // Вестник Санкт-Петербургского университета. Серия 1. Математика. Механика. Астрономия, Т. 4, No. 2, 2017.
- [236] Ковалев, В.А., Радаев, Ю.Н., Семенов, Д.А. Связанные динамические задачи гиперболической термоупругости // Изв. Сарат. ун-та. Нов. сер. Сер. Математика. Механика. Информатика, Т. 9:4(2), с. 94–127 2009.
- [237] Ковалев, В.А., Радаев, Ю.Н. Волновые числа плоских GNIIIтермоупругих волн и неравенства, обеспечивающие их нормальность // Изв. Сарат. ун-та. Нов. сер. Сер. Математика. Механика. Информатика, Т. 10:3, с. 46–53, 2010.

- [238] Радаева, Ю.Н., Таранова, М.В. Волновые числа термоупругих волн в волноводе с теплообменом на боковой стенке // Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки, Вып. 2(23), с. 53 – 61, 2011.
- [239] Кривцов, А.М. Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой. М.: Физматлит, 304 с., 2007.
- [240] Кривцов, А.М. Колебания энергий в одномерном кристалле // Доклады академии наук, Т. 458, No. 3, с. 279–281, 2014.
- [241] Кривцов, А.М., Бабенков, М.Б., Цветков, Д.В. Распространение тепла в одномерном гармоническом кристалле на упругом основании // Физическая мезомеханика, Т. 22, No. 2, с. 67–76, 2019.
- [242] Кривцов, А.М., Морозов, Н.Ф. О механических характеристиках наноразмерных объектов // Физика твердого тела, Т. 44, No. 12, с. 2158–2163, 2002.
- [243] Кривцов, А.М., Кузькин, В.А. Вывод уравнений состояния идеальных кристаллов простой структуры // Известия РАН. Механика твердого тела, Т. 46, No. 3, с. 387–399, 2011.
- [244] Кривцов, А.М. Распространение тепла в бесконечном одномерном гармоническом кристалле // Доклады академии наук, Т. 60, с. 407–4116 2015.
- [245] Кузькин, В.А., Кривцов, А.М. Высокочастотные тепловые процессы в гармонических кристаллах // Доклады академии наук, Т. 472, No. 5, c. 529–533, 2017.
- [246] Кузькин, В.А., Кривцов, А.М. Аналитическое описание переходных тепловых процессов в гармонических кристаллах // Физика твердого тела, Т. 59, вып. 5, с. 1023-1035, 2017.

- [247] Кукушкин, С.А., Осипов, А.В., Телятник, Р.С. Упругое взаимодействие точечных дефектов в кубических и гексагональных кристаллах // Физика твердого тела, Т. 58, Вып. 5, 2016.
- [248] Ле-Захаров, А.А., Кривцов, А.М. Исследование процесса теплопроводности в кристаллах с дефектами методом молекулярной динамики // Доклады академии наук, Т. 420, No. 1, с. 46-49, 2008.
- [249] Линьков, А.М. Комплексный метод граничных интегральных уравнений теории упругости. СПб: Наука, 1999.
- [250] Ломакин, Е.В., Лурье, С.А., Белов, П.А., Рабинский, Л.Н. Об обобщенном законе теплопроводности в обратимой термодинамике деформирования сплошной среды // Доклады Академии наук, Т. 483, No. 6, 2018.
- [251] Маневич, Л.И., Гендельман, О.В. Аналитически разрешимые модели механики твердого тела. Регулярная и хаотическая динамика, 338 с., 2016.
- [252] Мещеряков, Ю.И. Многомасштабные ударно-волновые процессы в твердых телах // СПб.: Нестор-История, 480 с., 2018.
- [253] Морозов, Н.Ф., Паукшто, М.В. Дискретные и гибридные модели механики разрушения. Изд-во С.-Петербургского университета, 1995.
- [254] Мусхелишвили, Н.И., Крылов, А.Н. Некоторые основные задачи математической теории упругости. Москва: АН СССР, 1949.
- [255] В. Новацкий, Динамические задачи термоупругости. Пер. с польск. под ред. Г. С. Шапиро, М.: Мир, 256 с., 1970.
- [256] Панченко, А.Ю., Подольская, Е.А., Кривцов, А.М. Анализ уравнения состояния и определение функции Грюнайзена для двумерных кристаллических решеток // Доклады Академии наук, Т. 473, No. 2, с. 159–162, 2017.

- [257] Псахье, С.Г., Зольников, К.П., Коноваленко, Ив.С. Молекулярнодинамическое исследование формирования наноструктур и их поведения в условиях внешнего воздействия // Синтез и свойства нанокристаллических и субструктурных материалов. Под ред. Коротаева А.Д. Томск: изд-во Том. ун-та, 2007. с.147-181.
- [258] Псахье, С.Г., Зольников, К.П., Крыжевич, Д.С. Расчеты диффузионных свойств межзеренных границ в нанокристаллической меди // Физическая мезомеханика, Т.10, No. 4, с. 53–57, 2007.
- [259] Псахье, С.Г., Остермайер, Г.П., Дмитриев, А.И., Шилько, Е.В., Смолин, А.Ю., Коростелев, С.Ю. Метод подвижных клеточных автоматов как новое направление дискретной вычислительной механики. І. Теоретическое описание // Физическая мезомеханика, No. 3(2), 2000.
- [260] Товстик, П. Е., Товстик, Т.П. Статический и динамический анализ двухмерных решеток графита // Известия Российской академии наук. Механика твердого тела, No. 5, с. 35–43, 2012.
- [261] Фортов, В.Е. Экстремальные состояния вещества. М., 304 с., 2009.
- [262] Хадеева, Л.З., Дмитриев, С.В., Кившарь, Ю.С. Дискретные бризеры в деформированном графене // Письма в журнал экспериментальной и теоретической физики, Т. 94, No. 7, с. 580-584, 2011.