УДК 539

А.С.Ситников, В.А.Суханова (2 курс, каф. МПУ), А.М.Кривцов, д.ф.-м.н., проф.

АНАЛИЗ КОЛЕБАНИЙ ЭНЕРГИИ В ПРОСТЕЙШИХ МОДЕЛЯХ КРИСТАЛЛА

Работа посвящена изучению колебаний кинетической и потенциальной энергий в одномерной цепочке, представляющей собой простейшую математическую модель кристалла.

Рассматривается цепочка, состоящая из одинаковых частиц (точечных масс), соединенных одинаковыми линейными пружинами. Если задать начальные условия таким образом, что начальные перемещения частиц равны нулю, а скорости распределены случайно, то тогда удельная потенциальная энергия $\Pi=0$, а кинетическая равна полной энергии: $K=E$. Согласно теореме о вириале при $t\to\infty$ кинетическая энергия должна стать равной потенциальной: $K=\Pi=E/2$. Численное интегрирование уравнений динамики цепочки показывает, что изменение энергий носит колебательный характер с периодом, близким к четверти периода, соответствующего парциальной частоте.

Для аналитического решения этой задачи вводятся обобщенные энергии, определяемые корреляциями скоростей различных частиц и деформаций различных связей в цепочке. Для обобщенных функций Лагранжа выводятся дифференциально-разностные уравнения, по форме совпадающие с уравнением динамики цепочки и отличающиеся только значением коэффициента при разностном операторе. Решение полученной системы в пределе бесконечного числа частиц дает для функции Лагранжа цепочки $L=EJ_0(4\omega_0 t)$, где ω_0 — парциальная частота, $J_0(x)$ — цилиндрическая функция первого рода. Из этого решения следует, что колебания происходят приблизительно с частотой $4\omega_0$; амплитуда колебаний обратно пропорциональна корню из времени; функция Лагранжа удовлетворяет дифференциальному уравнению для массы, движущейся под действием линейной упругой силы и линейного вязкого трения, коэффициент которого обратно пропорционален времени.

Также был рассмотрен случай, когда механическая энергия распределена между кинетической и потенциальной поровну. В этом случае функция Лагранжа также выражается через цилиндрическую функцию, но с другим индексом: $L=EJ_1(4\omega_0 t)/2$. В общем случае распределения начальных энергий колебания складываются из двух приведенных выше. Наиболее быстрое затухание колебаний энергии реализуется, если начальная кинетическая энергия в два раза больше начальной потенциальной.

Аналогичные вычисления были проведены для линейной цепочки с чередующимися массами и чередующимися жесткостями пружин между ними, а также для двумерной квадратной кристаллической решетки. В первом случае колебания имеют аналогичный вид, но зависят от распределения масс и жесткостей. В последнем случае получена полная аналогия с одномерной задачей, так как система уравнений распадается на 4 независимых уравнения для отдельных компонент.

Частота колебаний, полученная в результате вычислений, чрезвычайно велика (в четыре раза выше парциальной частоты). Поэтому в ходе этих колебаний температуру нельзя связывать с кинетической энергией, постоянно переходящей в потенциальную и обратно. В этом случае правильнее температуру определять полной энергией колебаний. Только после затухания переходного процесса, для которого требуются времена порядков десятков периодов $T_0= 2\pi/\omega_0$, температура может быть связана с кинетической энергией.