

Министерство образования и науки Российской Федерации

---

САНКТ-ПЕТЕРБУГСКИЙ  
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ  
ПЕТРА ВЕЛИКОГО

---

*О.С. Лобода, А. М. Кривцов, В. А. Кузькин, С. А. Щербинин*

**Теория колебаний:  
основы динамики кристаллической решетки.**

Учебное пособие

Санкт-Петербург

2025

УДК 531 (075.8)

Лобода О.С., Кривцов А.М., Кузькин В.А, Щербинин С.А. Теория колебаний: основы динамики кристаллической решетки. Учебное пособие. 2025. – 20 с.

Соответствует содержанию разделов дисциплины «Теория колебаний» подготовки студентов по направлениям 01.03.03 «Механика и математическое моделирование», 15.03.03 «Прикладная механика».

В пособии рассматривается простейшая модель твердого тела с микроструктурой – идеальный монокристалл. Записываются уравнения динамики в дискретном случае и в длинноволновом приближении, определяются дисперсионные характеристики, фазовые и групповые скорости. Для одномерного гармонического кристалла строится общее решение с учетом начальных условий, а также фундаментальное решение. Описывается методика, позволяющая вывести континуальные уравнения линейной теории упругости из дискретных уравнений движения атомов кристаллической решетки.

Предназначено для студентов и аспирантов, изучающих теоретическую механику, механику сплошной среды и физику твердого тела.

Табл. 1. Библиогр.: 18 назв.

## Оглавление

<b>Введение</b>	4
<b>1 Общие сведения</b>	5
1.1 Кристаллическая решетка	5
1.2 Длинноволновое приближение	6
<b>2 Динамика одномерного гармонического кристалла</b>	6
2.1 Уравнение динамики	6
2.2 Одномерный кристалл на упругом основании	9
2.3 Построение общего решения с учетом начальных условий	11
2.4 Фундаментальное решение	13
<b>3 Динамика двух-, трехмерного гармонического кристалла</b>	15
3.1 Уравнение динамики	15
3.2 Соотношения упругости	17
<b>Библиографический список</b>	19

## Введение

Идеальный кристалл является удобной математической моделью для описания волновых процессов в линейных и нелинейных системах. Рассматривается множество взаимодействующих частиц (материальных точек). В равновесии расположение частиц в пространстве характеризуется трансляционной симметрией, т.е. они образуют идеальную кристаллическую решетку. В данном пособии мы ограничимся рассмотрением линейного упругого деформирования. Будем считать, что каждая частица взаимодействует лишь со своими ближайшими соседями.

Идеальный монокристалл является также простейшей моделью твердого тела с микроструктурой. Исследование сред с микроструктурой в значительной степени началось с анализа динамики кристаллических решеток. Основопологающими в этой области считаются работы М. Борна и др. [2]. В них, в частности, получены линейные соотношения упругости для идеального кристалла на основе развитого Борном метода длинных волн. Впоследствии механика кристаллических решеток исследовалась многими авторами [1, 3, 7-10]. С теорией колебаний и линейной теорией упругости можно познакомиться в книгах [6, 13-18]. Моделирование распространения тепловых процессов в гармонических кристаллах описывается в [11, 12].

В пособии используется математический аппарат прямого тензорного исчисления. Векторные величины будем обозначать однократным подчеркиванием  $\underline{a}$ , тензорные – двукратным подчеркиванием  $\underline{\underline{A}}$ . Ранг тензора обозначается верхним индексом слева, например  ${}^4\underline{\underline{A}}$  – тензор четвертого ранга. Для тензоров второго ранга этот индекс, как правило, опускается. Более подробно с тензорным исчислением и особенностями его применения в задачах механики можно ознакомиться в [1, 3-5, 9, 10, 17].

## 1. Общие сведения

### 1.1. Кристаллическая решетка

Кристаллической решеткой называется множество точек (узлов) в трехмерном пространстве, для которого существует такая тройка некопланарных векторов, что смещение этого множества на любой из них есть тождественное преобразование. Очевидно, что подобное множество должно быть неограниченным в пространстве. Если указанная тройка векторов существует, то она может быть определена не единственным образом. В качестве основной тройки выбирается такая, чтобы параллелепипед, построенный на ее векторах, имел минимальный объем. Эти векторы называются основными, а параллелепипед – примитивной элементарной ячейкой. Основные векторы также установлены неоднозначно, однако всегда можно выделить какую-нибудь одну тройку из возможных. Введенное понятие решетки может быть распространено на пространство произвольной размерности, в том числе на одно- и двухмерные пространства.

Совокупность узлов, которая может быть получена из некоторого одного узла композициями перемещений на основные векторы, называется решеткой Браве данной кристаллической решетки. Решетка, совпадающая со своей решеткой Браве является простой, не совпадающая – сложной. Иными словами, простой называется решетка, для которой перемещение на вектор, соединяющий любые два узла, есть тождественное преобразование. Элементарная ячейка простой решетки содержит один узел, сложной – несколько. В пособии мы рассмотрим только простые кристаллические решетки.

Отметим, что только при недеформированном состоянии кристалла частицы находятся в узлах решетки, при деформации они получают некоторые смещения и с узлами уже не совпадают.

## 1.2 Длинноволновое приближение

Для получения макроскопических уравнений будет использоваться так называемое длинноволновое приближение [2]. Суть его состоит в том, что рассматриваются лишь функции, мало меняющиеся на расстояниях, сравнимых с длинами основных векторов. В динамике это можно сформулировать так: рассматриваются волны, длины которых много больше межатомных расстояний.

## 2. Динамика одномерного гармонического кристалла

### 2.1 Уравнение динамики

Рассмотрим простейшую модель одномерного гармонического кристалла – цепочку одинаковых частиц (материальных точек) массой  $m$ , взаимодействующих между собой посредством линейной упругой связи,  $C$  – жесткость связи. На  $n$ -ую частицу действуют со стороны ее ближайших соседей силы упругости  $F_{n+1} = C(u_{n+1} - u_n)$  и  $F_n = C(u_n - u_{n-1})$ , где  $u_n$  – перемещение частицы. Запишем уравнение динамики для  $n$ -ой частицы

$$m\ddot{u}_n = F_{n+1} - F_n.$$

Подставим выражения для сил упругости:  $m\ddot{u}_n = C(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1})$ .

Обозначим  $\omega_0 = \sqrt{C/m}$ , тогда уравнение динамики будет иметь вид:

$$\ddot{u}_n = \omega_0^2(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}). \quad (1)$$

Для бесконечной цепочки частиц имеем бесконечное число уравнений. Используем длинноволновое приближение для получения микроскопического уравнения динамики. Пусть  $a$  – расстояние между частицами в положении равновесия или шаг решетки,  $x = na$ . Перемещение частицы будем рассматривать как функцию от ее положения  $u_n \rightarrow u(x)$ . Разложим функции перемещений соседних частиц в ряд вблизи положения равновесия:

$$u_{n+1} = u(x + a) \approx u(x) + u'(x)a + \frac{1}{2}u''(x)a^2 + \dots$$

$$u_{n-1} = u(x - a) \approx u(x) - u'(x)a + \frac{1}{2}u''(x)a^2 + \dots$$

$$u' = \frac{du}{dx}, \quad u'' = \frac{d^2u}{dx^2}.$$

Подставим функции перемещений в уравнение (1) и, отбрасывая слагаемые более высокого порядка малости, перейдем от уравнения в конечных разностях, описывающего дискретную среду, к уравнению в частных производных для континуальной среды:

$$\ddot{u} = c^2 u'' \quad (2)$$

Получили волновое уравнение – линейное гиперболическое дифференциальное уравнение в частных производных, где  $c = \omega_0 a$  имеет смысл скорости распространения волны в одномерном кристалле. Одним из решений волнового уравнения является гармоническая волна – волна, при которой колеблющаяся точка среды совершает гармонические колебания:

$$u(x, t) = A \cos(k(x - ct)) = A \cos(kx - \omega t),$$

где  $\omega \stackrel{\text{def}}{=} kc$  – частота колебаний,  $k$  – волновое число (имеет смысл пространственной частоты),  $A$  – амплитуда волны,  $kx - \omega t$  – фаза волны. Обозначим:

$$T = \frac{2\pi}{\omega} \text{ – период колебаний,}$$

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} \text{ – длина волны (пространственный период).}$$

Это решение также можно записать в экспоненциальной форме

$$u_n u(x, t) = \text{Re}(e^{i(kx - \omega t)}).$$

В многомерном пространстве аналогом этого решения будет являться вектор

$$\underline{u}(\underline{r}, t) = \cos(\underline{k} \cdot \underline{r} - \omega t),$$

тогда  $\underline{k}$  – это волновой вектор.

Дисперсионное соотношение или закон дисперсии – это зависимость частоты волны от волнового вектора:  $\omega = \omega(k)$ . Математический вид этой зависимости, выражающей связь временной и пространственной периодичности

волны, определяется свойствами рассматриваемых колебаний и среды, в которой они распространяются. Дисперсионное соотношение получают обычно из дифференциального уравнения движения среды, подставляя в него решение в виде гармонической волны. Если зависимость линейная, то считается, что в среде нет дисперсии.

Скорость перемещения фазы гармонической волны называется фазовой скоростью  $v_\phi$ . Выражение для фазовой скорости определим из условия постоянства фазы волны  $kx - \omega t = \text{const}$ . Тогда перемещения точки, обладающей постоянной фазой, можно записать в следующем виде:

$$x = \frac{\omega}{k}t - \frac{\omega \text{ const}}{k} = v_\phi t - x_0.$$

Таким образом, фазовая скорость  $v_\phi \stackrel{\text{def}}{=} \omega/k$ . Если наблюдатель движется вдоль оси  $O_x$  со скоростью  $v_\phi$ , то он видит одну и ту же фазу волны. Групповая скорость  $v_{\text{гр}}$  характеризует скорость переноса энергии и определяется следующим образом:

$$v_{\text{гр}} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{d\omega}{dk}.$$

Для одномерной среды, которая характеризуется волновым уравнением (2), фазовая и групповая скорости гармонической волны совпадают и равны  $c$ , дисперсия отсутствует:

$$v_\phi = v_{\text{гр}} = c; \quad \omega = kc. \quad (3)$$

Получим дисперсионное соотношение для дискретного одномерного гармонического кристалла. Представим решения для  $u_n, u_{n+1}$  и  $u_{n-1}$  в экспоненциальной форме

$$u_n = Ae^{i(kx - \omega t)}, \quad u_{n+1} = e^{ika}u_n, \quad u_{n-1} = e^{-ika}u_n$$

и подставим в уравнение (1):

$$-\omega^2 = \omega_0^2(e^{ika} + e^{-ika} - 2) \left| \begin{array}{l} \cos ka = \frac{e^{ika} + e^{-ika}}{2} \\ \Rightarrow -\omega^2 = 2\omega_0^2(\cos ka - 1) = -4\omega_0^2 \sin^2 \frac{ka}{2}. \end{array} \right.$$

В результате получаем дисперсионное соотношение

$$\omega = 2\omega_0 \sin \frac{ka}{2}. \quad (4)$$

В дискретной среде имеется дисперсия, определяемая формулой (4).

Вычислим групповую скорость:

$$v_{\text{гр}} = \frac{d\omega}{dk} = 2\omega_0 \frac{a}{2} \cos \frac{ka}{2} = c \cos \frac{ka}{2}.$$

Для длинных волн (при малом  $k$ )  $v_{\text{гр}} = c$ .

## 2.2 Одномерный кристалл на упругом основании.

Рассмотрим одномерный гармонический кристалл (модель п.2.1), лежащий на упругом основании. Каждая частица взаимодействует с ближайшими соседями посредством упругой связи жесткостью  $C$  и с подложкой посредством упругой связи жесткостью  $C_1$ . Запишем уравнение динамики для  $n$ -ой частицы:

$$m\ddot{u}_n = C(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) - C_1 u_n.$$

Обозначим

$$\omega_1 = \sqrt{\frac{C_1}{m}}.$$

Уравнение динамики перепишем в следующем виде:

$$\ddot{u}_n = \omega_0^2(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) - \omega_1^2 u_n. \quad (5)$$

Используем длинноволновое приближение для перехода от дискретной среды к континуальной и получим уравнение в частных производных, которое является обобщением волнового уравнения (2) и называется уравнением Клейна-Гордона:

$$\ddot{u} = c^2 u'' - \omega_1^2 u. \quad (6)$$

Подставим в уравнение (6) решение в виде плоской гармонической волны  $u = A \cos(kx - \omega t)$  и получим дисперсионное соотношение для случая

длинноволнового приближения, а также выражения для фазовой и групповой скоростей:

$$\omega^2 = c^2 k^2 + \omega_1^2 \Rightarrow \omega = \sqrt{c^2 k^2 + \omega_1^2},$$

$$v_\phi = \frac{\omega}{k} = \sqrt{c^2 + \left(\frac{\omega_1}{k}\right)^2} \text{ – фазовая скорость,} \quad (7)$$

$$v_{\text{гр}} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{kc^2}{\sqrt{c^2 k^2 + \omega_1^2}} \text{ – групповая скорость.}$$

При наличии упругого основания в кристалле имеет место дисперсия даже в случае длинноволнового приближения. Фазовая и групповая скорости не совпадают.

Вернемся к дискретной среде. Подставим в уравнение (5) решение в экспоненциальной форме  $u_n = Ae^{i(kan - \omega t)}$  и получим дисперсионное соотношение для дискретного одномерного гармонического кристалла на упругом основании:

$$\omega^2 = 4\omega_0^2 \sin^2 \frac{ka}{2} + \omega_1^2. \quad (8)$$

При  $\omega_1 = 0$ , то есть при отсутствии подложки, получаем дисперсию, описываемую формулой (4). Закон дисперсии определяет диапазон возможных частот:  $\omega_{\min} = \omega_1$ ,  $\omega_{\max} = \sqrt{\omega_1^2 + 4\omega_0^2}$ . Область частот ( $\omega_{\min} < \omega < \omega_{\max}$ ) определяет «окно прозрачности», в котором волна вдоль цепочки распространяется без затухания: действительным значением  $\omega$  соответствуют действительные значения  $k$  и наоборот. Из дисперсионного соотношения следует, что распространение волны с частотой меньше  $\omega_{\min}$  и большей  $\omega_{\max}$  возможна лишь когда  $\sin^2 \frac{ka}{2} < -1$  и  $\sin^2 \frac{ka}{2} > 1$ , что при действительных  $k$  невозможно, а значит волновое число  $k$  должно быть мнимым. Частоты  $\omega_{\min}$  и  $\omega_{\max}$  являются граничными частотами фильтра.

### 2.3 Построение общего решения с учетом начальных условий

Рассмотрим модель одномерного гармонического кристалла (модель п.2.1), состоящего из  $N$  одинаковых частиц. В качестве граничных условий возьмем условие периодичности  $u_{n+N} = u_n$ . Ищем решение в виде:

$$u_n = \tilde{C} e^{i(\omega t + qn)},$$

где  $q$  – произведение волнового числа на шаг решетки. Подстановка в уравнение (1) дает дисперсионное соотношение:

$$\omega^2 = 4\omega_0^2 \sin^2 \frac{q}{2}.$$

Из условия периодичности имеем:

$$e^{iq(n+N)} = e^{iqn} \Rightarrow e^{iqN} = 1 \Rightarrow \begin{cases} \cos qN = 1 \\ \sin qN = 0 \end{cases} \Rightarrow qN = 2\pi k,$$

$$q_k = \frac{2\pi k}{N},$$

где  $k$  – произвольное целое число. С учетом граничных условий периодичности получаем спектр значений частот:

$$\omega_k = \pm 2\omega_0 \sin \frac{\pi k}{N}.$$

Тогда общее решение может быть представлено как разложение по базисным функциям  $f_k(n) = e^{iq_k n}$ ,  $k = 0, \dots, N-1$ :

$$u_n = \sum_{k=1}^{N-1} [\tilde{C}_k^+ e^{i\omega_k t} + \tilde{C}_k^- e^{-i\omega_k t}] e^{iq_k n} + \tilde{C}_0^* t + \tilde{C}_0.$$

В силу периодичности, функции  $e^{iq_k n}$  для  $k$  не принадлежащего  $[0, N-1]$  в точности повторяют базисные функции  $f_k(n)$ . Здесь и далее под  $\omega_k$  будем понимать только положительные значения частот. Отметим, что выполняется

$$q_k n = q_n k = \frac{2\pi k n}{N}, \quad f_k(n) = f_n(k) = e^{2\pi i \frac{kn}{N}}.$$

Рассмотрим базисные функции:

$$f_k(n) = e^{iq_k n}, \quad q_k = \frac{2\pi k}{N}, \quad k = 0, \dots, N-1.$$

Здесь  $n$  – является аргументом,  $k$  – номером. Воспользуемся формулой суммирования геометрической прогрессии

$$\sum_{n=0}^{N-1} a^n = \frac{a^N - 1}{a - 1},$$

тогда при  $k \neq 0$

$$\sum_{n=0}^{N-1} f_k(n) = \sum_{n=0}^{N-1} (e^{iq_k})^n = \frac{e^{i2\pi} - 1}{e^{iq_k} - 1} = 0.$$

При  $k = 0$  сумма, очевидно, равна  $N$ . В результате получаем

$$\sum_{n=0}^{N-1} f_k(n) = \sum_{n=0}^{N-1} (e^{iq_k})^n = N\delta_k^N.$$

Находя вещественную и мнимую часть этого соотношения, получим:

$$\sum_{n=0}^{N-1} \cos(q_k n) = N\delta_k^N, \quad \sum_{n=0}^{N-1} \sin(q_k n) = 0.$$

Рассмотрим скалярное произведение базисных функций.

$$\sum_{n=0}^{N-1} f_k(n) \bar{f}_s(n) = \sum_{n=0}^{N-1} e^{iq_k n} e^{-iq_s n} = \sum_{n=0}^{N-1} e^{i(q_k - q_s)n} = \sum_{n=0}^{N-1} e^{iq_n(k-s)} = N\delta_{ks}^N.$$

Здесь чертой обозначена комплексно-сопряженная величина. Полученное соотношение представляет собой условие ортогональности базисных функций.

Удовлетворение начальному условию  $u_n|_{t=0} = 0$  дает:

$$\sum_{k=1}^{N-1} (\tilde{C}_k^+ + \tilde{C}_k^-) e^{iq_k n} + \tilde{C}_0 = 0,$$

$$(\tilde{C}_k^+ + \tilde{C}_k^-) = 0, \quad \tilde{C}_0 = 0.$$

Обозначив  $U_k = i(\tilde{C}_k^+ + \tilde{C}_k^-)$ , получим

$$u_n = \sum_{k=1}^{N-1} U_k \sin(\omega_k t) e^{iq_k n} + \tilde{C}_0^* t.$$

Обозначив  $V_0 = \tilde{C}_0^*$ ,  $V_k = \omega_k U_k$ , получим для скорости  $v_n$

$$v_n = \sum_{k=0}^{N-1} V_k \cos(\omega_k t) e^{iq_k n}.$$

Удовлетворение начальному условию  $\dot{u}_n|_{t=0} = \sigma \rho_n$  дает:

$$\sum_{k=0}^{N-1} V_k e^{iq_k n} = \sigma \rho_n,$$

где  $\sigma$  – дисперсия начальных скоростей;  $\rho_n$  – независимые случайные величины с нулевым математическим ожиданием и единичной дисперсией. Данные начальные условия соответствуют мгновенному возмущению. Для решения этого уравнения относительно  $V_k$  воспользуемся свойством ортогональности базисных функций. Домножение уравнения на  $e^{-iq_s n}$  с последующим суммированием дает:

$$\sigma \sum_{n=0}^{N-1} \rho_n e^{-iq_s n} = \sum_{k=0}^{N-1} V_k \sum_{n=0}^{N-1} e^{iq_k n} e^{-iq_s n} = \sum_{k=0}^{N-1} V_k N \delta_{ks}^N = N V_s.$$

В результате получаем выражение для амплитуд

$$V_k = \frac{\sigma}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \rho_n e^{-iq_k n}.$$

## 2.4 Фундаментальное решение

Рассмотрим воздействие  $\delta$ -функции на первый элемент одномерного гармонического кристалла в начальный момент времени, начальные скорости зададим нулевыми:

$$u_n^0 = \delta_n = \begin{cases} 1, & n = 0 \\ 0, & n \neq 0 \end{cases}, \quad n = 0, 1, 2, \dots, N - 1.$$

Решение, получаемое при заданных начальных условиях, будем называть фундаментальным решением. С использованием фундаментального решения возможно сконструировать решения при произвольных начальных условиях. Из

условия  $\dot{u}_n|_{t=0} = 0$  получим  $\tilde{C}_k^+ = \tilde{C}_k^- = \tilde{C}_k$ . Воспользуемся свойством ортогональности базисных функций. Домножение выражения для  $u_n$  на  $e^{-iq_s n}$  с последующим суммированием и использование начального условия для перемещений дает выражение для амплитуд:

$$\tilde{C}_s = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \delta_n e^{-iq_s n} = \frac{1}{N}.$$

Таким образом, получаем для  $u_n$

$$u_n = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} e^{iq_k n} \cos(\omega_k t).$$

Выделим действительную часть решения:

$$u_n = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \cos(q_k n) \cos(\omega_k t).$$

Перейдем от суммирования к интегральной форме. Воспользуемся следующим утверждением:

$$\frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} f\left(\frac{k}{N}\right) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \int_0^1 f(x) dx.$$

Напоминаем, что периодические граничные условия позволяют получить выражение  $q_k = \frac{2\pi k}{N}$ , тогда  $\omega_k = 2\omega_0 \sin\left(\frac{\pi k}{N}\right)$ . Запишем решение в виде интеграла:

$$u_n = \int_0^1 \cos(2\pi n x) \cos(\omega_0 t \sin(\pi x)) dx.$$

Пусть  $\pi x = \eta$ , тогда:

$$u_n = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \cos(2n\eta) \cos(\omega_0 t \sin(\eta)) d\eta.$$

Используем тождество  $\cos(\alpha)\cos(\beta) = \frac{1}{2}[\cos(\alpha - \beta) + \cos(\alpha + \beta)]$ , тогда

$$u_n = \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi [\cos(2\pi\eta - \omega_0 t \sin(\eta)) + \cos(2\pi\eta + \omega_0 t \sin(\eta))] d\eta.$$

Замечаем, что выражение для  $u_n$  можно записать через функции Бесселя:

$$u_n = \frac{1}{2} [J_{2n}(\omega_0 t) + J_{-2n}(\omega_0 t)],$$

где функция Бесселя:

$$J_\alpha(\tau) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \cos(\alpha\eta - \tau \sin(\eta)) d\eta.$$

Для натуральных  $n$ :  $J_{-n}(\tau) = (-1)^n J_n(\tau)$ . Для  $n$ -ой частицы получаем:

$$u_n = J_{2n}(\omega_0 t).$$

### 3. Динамика двух-, трехмерного гармонического кристалла

#### 3.1 Уравнения динамики

Рассматриваем простую кристаллическую решетку, которая состоит из частиц одного вида массой  $m$ , взаимодействующих посредством линейных упругих сил. Предполагается, что каждая частица взаимодействует со своими ближайшими соседями.

Рассмотрим некоторую частицу, которую для удобства будем называть исходной и присвоим номер  $\alpha = 0$ . Остальные будут нумероваться  $\alpha = -1, +1, -2, +2, \dots -N, +N$ . Нумерация производится таким образом, чтобы частицы, расположенные симметрично относительно исходной, имели индексы, противоположные по знаку. Обозначим  $\underline{a}_\alpha$  радиус-вектор, определяющий положение частицы с номером  $\alpha$  относительно исходной частицы в отсчетной конфигурации. В качестве отсчетной конфигурации используется недеформируемое состояние кристалла. Очевидно, что  $\underline{a}_{-\alpha} = -\underline{a}_\alpha$ . Запишем уравнение динамики для исходной частицы:

$$m\ddot{u} = \sum_{\alpha} \underline{F}_\alpha. \quad (9)$$

$\underline{F}_\alpha$  – вектор силы, действующий на исходную частицу со стороны частицы с индексом  $\alpha$ ,  $\underline{a}_\alpha = a\underline{e}_\alpha$ ,  $\underline{F}_\alpha = C\varepsilon_\alpha\underline{e}_\alpha$ ,  $C$  – жесткость связи,  $\varepsilon_\alpha$  – деформация связи,  $\underline{e}_\alpha$  – орт, определяющий направление. Обозначим  $\tilde{\underline{a}}_\alpha$  радиус-вектор,

определяющий положение частицы с номером  $\alpha$  относительно исходной частицы в актуальной конфигурации. В первом приближении при малых перемещениях можно считать, что  $\tilde{\underline{a}}_\alpha = \underline{a}_\alpha$ ,  $\tilde{\underline{e}}_\alpha = \underline{e}_\alpha$ ,  $|\underline{u}| \ll |\underline{a}_\alpha|$ . Во втором приближении  $\tilde{\underline{a}}_\alpha = \underline{a}_\alpha + \underline{u}_\alpha - \underline{u}$ , где  $\underline{u}_\alpha$  – вектор перемещения частицы с номером  $\alpha$ . Запишем деформацию связи в виде  $\varepsilon_\alpha = \underline{e}_\alpha \cdot (\underline{u}_\alpha - \underline{u})$  и подставим в выражение для вектора силы  $\underline{F}_\alpha = C \underline{e}_\alpha \varepsilon_\alpha \cdot (\underline{u}_\alpha - \underline{u})$ , а затем в уравнение (9). Уравнение динамики исходной частицы будет выглядеть следующим образом:

$$m\ddot{\underline{u}} = \sum_{\alpha} C \underline{e}_\alpha \varepsilon_\alpha \cdot (\underline{u}_\alpha - \underline{u}). \quad (10)$$

Рассмотрим координационный тензор, который можно заметить в выражении для суммарной силы:

$$\underline{\underline{\varepsilon}} = \sum_{\alpha} \underline{e}_\alpha \underline{e}_\alpha.$$

Вычислим координационный тензор для квадратной решетки  $\underline{\underline{\varepsilon}} = \underline{\underline{ii}} + \underline{\underline{jj}} + \underline{\underline{(-i)(-i)}} + \underline{\underline{(-j)(-j)}} = 2\underline{\underline{E}}$ . Для треугольной решетки вычисления дадут:

$\underline{\underline{\varepsilon}} = 3\underline{\underline{E}}$ . В общем случае для координационного тензора  $\underline{\underline{\varepsilon}} = \lambda \underline{\underline{E}}$ , где  $\lambda$  – константа, которая зависит от геометрии решетки. След координационного тензора  $tr(\underline{\underline{\varepsilon}}) = \lambda tr(\underline{\underline{E}}) = \lambda d$ ,  $d$  – размерность пространства. Также можно заметить, что:

$$tr(\underline{\underline{\varepsilon}}) = \sum_{\alpha} \underline{e}_\alpha \cdot \underline{e}_\alpha = M,$$

где  $M$  – координатное число или число ближайших соседей исходной частицы. Таким образом  $\lambda d = M \Leftrightarrow \lambda = M/d$ .

В таблице 1 приведены значения параметров  $d$ ,  $M$  и  $\lambda$  для наиболее часто встречающихся решеток в пространстве размерности  $d = 1, 2, 3$ . В одномерном пространстве это цепочка частиц. В двумерном пространстве – треугольная (она же ГПУ – гексагональная плотноупакованная) и квадратная решетки.

В трехмерном пространстве рассмотрим кубическую, объемно-центрированную кубическую (ОЦК) и гранецентрированную кубическую (ГЦК) решетки. Основу ОЦК-решетки составляет элементарная кубическая ячейка, в которой частицы находятся в вершинах куба, и еще один атом в центре его объема, т. е. на пересечении его диагоналей. У ГЦК-решетки элементарной ячейкой служит куб с центрированными гранями.

**Таблица 1.** Значения  $d$ ,  $M$  и  $\lambda$  для плотноупакованных решеток

$d$	Решетка	$M$	$\lambda$
1	Цепочка	2	2
2	Квадратная	4	2
2	Треугольная	6	3
3	Кубическая	6	2
3	ОЦК	8	8/3
3	ГЦК	12	4

### 3.2 Соотношения упругости

Предполагая справедливость длинноволнового приближения, разложим  $\underline{u}_\alpha$  в ряд:

$$\underline{u}_\alpha = \underline{u}(\underline{r} + \underline{a}_\alpha) = \underline{u}(\underline{r}) + \underline{a}_\alpha \cdot \nabla \underline{u} + \frac{1}{2} \underline{a}_\alpha \underline{a}_\alpha \cdots \nabla \nabla \underline{u} + \dots$$

Символ  $\nabla$  обозначает векторный дифференциальный оператор Гамильтона (дифференцирование по вектору  $\underline{r}$ ). Подставим  $\underline{u}_\alpha$  в уравнение (10):

$$m \ddot{\underline{u}} = Ca \sum_{\alpha} \underline{e}_\alpha \underline{e}_\alpha \underline{e}_\alpha \cdots \nabla \underline{u} + \frac{Ca^2}{2} \sum_{\alpha} \underline{e}_\alpha \underline{e}_\alpha \underline{e}_\alpha \underline{e}_\alpha \cdots \nabla \nabla \underline{u}. \quad (11)$$

Рассмотрим сумму в первом слагаемом.

$$\sum_{\alpha} \underline{e}_\alpha \underline{e}_\alpha \underline{e}_\alpha = \sum_{\alpha > 0} \underline{e}_\alpha \underline{e}_\alpha \underline{e}_\alpha - \sum_{\alpha < 0} \underline{e}_\alpha \underline{e}_\alpha \underline{e}_\alpha = 0, \quad \underline{e}_{-\alpha} = \underline{e}_\alpha.$$

Введем обозначение:  $\rho = \frac{m}{V_0}$ ,  $V_0$  – объём элементарной ячейки кристаллической решетки,  $\rho$  – массовая плотность. Объём элементарной ячейки связан с размерностью пространства простым соотношением  $V_0 = ka^d$ , где  $k$  – константа, зависящая от геометрии решетки. В двумерном пространстве для квадратной решетки  $V_0 = a^2$ , для треугольной решётки  $V_0 = \frac{\sqrt{3}}{2}a^2$ . С введенными обозначениями уравнение (11) принимает вид:

$$\rho \ddot{\underline{u}} = \underline{\underline{4C}} \cdots \nabla \nabla \underline{u}. \quad (12)$$

Отметим, что уравнение (12) по своей структуре совпадает с уравнением динамики среды в макроскопической теории упругости, а тензор

$$\underline{\underline{4C}} = \frac{Ca^2}{2V_0} \sum_a \underline{e}_\alpha \underline{e}_\alpha \underline{e}_\alpha \underline{e}_\alpha$$

имеет смысл тензора жесткости сплошной среды и определяется структурой кристаллической решетки. Перепишем уравнение (12) в виде:

$$\rho \ddot{\underline{u}} = \nabla \cdot \underline{\underline{4C}} \cdots \nabla \underline{u}.$$

Обозначим  $\underline{\underline{\tau}} = \underline{\underline{4C}} \cdots \nabla \underline{u}$  – тензор напряжений сплошной среды,  $\underline{\underline{\varepsilon}} = \nabla \underline{u}$  – тензор деформаций. Таким образом, получили обобщенный закон Гука сплошной среды  $\underline{\underline{\tau}} = \underline{\underline{4C}} \cdots \underline{\underline{\varepsilon}}$ . Уравнение динамики (12) с учетом геометрического соотношения для тензора деформаций и определяющее уравнение в виде обобщенного закона Гука дают замкнутую систему уравнений динамики сплошной среды. Вывод соотношений, связывающих микроскопические и макроскопические параметры кристаллических решеток, более строгое введение терминологии и подробный анализ как простых, так и сложных решеток дается в монографии [9].

## Библиографический список

1. Беринский И.Е., Кривцов А.М., Кударова А.М., Кузькин В.А., Лобода О.С., Хакало С.А. Механические свойства ковалентных кристаллов: учебное пособие. Санкт-Петербург: Изд-во Политехн. ун-та, 2014.
2. Борн М., Кунь Х. Теория кристаллических решеток. М.: Изд-во иностр. лит., 1959. 488 с.
3. Иванова Е.А., Кривцов А.М., Морозов Н.Ф., Фирсова А.Д. Теоретическая механика. Определение эквивалентных упругих характеристик дискретных систем: Учеб. пособие. СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2004. 32 с.
4. Жилин П.А. Векторы и тензоры второго ранга в трехмерном пространстве. СПб.: Нестор, 2001. 276 с.
5. Жилин П.А. Теоретическая механика. СПб.: Изд-во СПбГТУ, 2001. 146 с.
6. Карлов Н.В., Кириченко Н.А. Колебания, волны, структуры. М.: ФИЗМАТЛИТ. – 2003. – 496 с.
7. Косевич А.М. Основы механики кристаллической решетки. М.: Наука, 1972.
8. Косевич А.М. Теория кристаллической решетки. Харьков: Вища школа, 1988.
9. Кривцов А.М. Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой. М.: ФИЗМАТЛИТ. – 2007. – 304 с.
10. Кривцов А.М. Теоретическая механика. Упругие свойства одноатомных и двухатомных кристаллов: учебное пособие. Санкт-Петербург: Изд-во Политехн. ун-та, 2009.
11. Кривцов А.М. Распространение тепла в бесконечном одномерном гармоническом кристалле. Доклады Академии наук, Т. 60, 407, 2015.
12. Кривцов А.М., Бабенков М.Б., Цветков Д.В. Распространение тепла в одномерном гармоническом кристалле на упругом основании. Физическая мезомеханика, Т. 22 (2), 67, 2019.

13. Кунин И.А. Теория упругих сред с микроструктурой. М.: Наука, 1975. 416 с.
14. Лойцянский Л.Г., Лурье А.И. Курс теоретической механики. М.: Наука, 1982. 352 с.
15. Лурье А.И. Теория упругости. М.: Наука, 1970.
16. Мандельштам Л.И. Лекции по теории колебаний. М.: Издат.: Наука. – 1972. – 471 с.
17. Пальмов В.А. Колебания упруго-пластических тел. М.: Наука, 1976. 348 с.
18. Трусделл К. Первоначальный курс рациональной механики сплошных сред. М.: Мир, 1975.