УДК 537.8, 539.2, 517.9

DOI: https://doi.org/10.34680/2076-8052.2022.3(128).11-14

ОДНОМЕРНАЯ КЛАССИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДИНАМИКИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ С УЧЕТОМ ЗАПАЗДЫВАЮЩИХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ

А.Ю.Захаров, М.А.Захаров

ONE-DIMENSIONAL CLASSICAL MODEL OF CRYSTAL LATTICE DYNAMICS TAKING INTO ACCOUNT THE RETARDATION OF INTERACTIONS

A.Yu.Zakharov, M.A.Zakharov

Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого, Anatoly.Zakharov@novsu.ru

Динамика колебаний одномерной атомной цепочки исследуется в гармоническом приближении с учетом запаздывания межатомных взаимодействий. Обнаружено, что запаздывание взаимодействий между частицами приводит к радикальной перестройке динамики одномерной гармонической цепочки. В частности, из-за запаздывания взаимодействий стационарные свободные колебания в атомной цепочке невозможны. Получен критерий отсутствия нарастающих колебаний в системе, этот критерий является условием стабильности цепочки. Показано, что при погружении устойчивой цепочки частиц с запаздывающими взаимодействиями между ними в переменное внешнее поле система переходит в стационарное состояние, которое зависит как от свойств системы, так и от характеристик внешнего поля. Это стационарное состояние было интерпретировано как динамическое равновесие между атомной цепочкой и внешним полем.

Ключевые слова: динамика многочастичных систем; запаздывающие взаимодействия; необратимость; термодинамическое равновесие

Для цитирования: Захаров А.Ю., Захаров М.А. Одномерная классическая модель динамики кристаллической решетки с учетом запаздывающих взаимодействий // Вестник НовГУ. Сер.: Технические науки. 2022. №3(128). С.11–14. DOI: https://doi.org/10.34680/2076-8052.2022.3(128).11-14

The dynamics of oscillations of a one-dimensional atomic chain is investigated in the harmonic approximation, taking into account the retardation of interatomic interactions. It is found that the retardation of interactions between particles leads to a radical restructuring of the dynamics of a one-dimensional harmonic chain. In particular, due to the retardation of interactions, stationary free oscillations in the atomic chain are impossible. A criterion for the absence of growing oscillations in the system has been obtained, and this criterion is a condition for the stability of the chain. It is shown that when a stable chain of particles with retarded interactions between them is immersed in an alternating external field, the system passes into a stationary state, which depends both on the properties of the system and on the characteristics of the external field. This stationary state has been interpreted as a dynamic equilibrium between an atomic chain and an external field.

Keywords: multi-particle system dynamics, retarded interactions, irreversibility, thermodynamic equilibration

For citation: Zakharov A.Yu., Zakharov M.A. One-dimensional classical model of crystal lattice dynamics taking into account the retardation of interactions // Vestnik NovSU. Issue: Engineering Sciences. 2022. №3(128). P.11–14. DOI: https://doi.org/10.34680/2076-8052.2022.3(128).11-14

1. Введение

Основные принципы динамической теории кристаллических решеток с мгновенными взаимодействиями между частицами были разработаны в основном в работах Борна и его соавторов [1,2]. Дальнейшее развитие динамики кристаллов было направлено на учет особенностей кристаллических структур, моделей межатомных потенциалов, дефектов в кристаллах, нелинейных эффектов и т.д. [3–5]. В рамках этой теории система взаимодействующих частиц эквивалентна системе невзаимодействующих осцилляторов. Закон дисперсии осцилляторов (фононов) связан с характеристиками межатомных потенциалов. Известно, что взаимодействия между частицами имеют полевое происхождение, и поэтому мгновенные взаимодействия невозможны. Однако работ по проявлению эффекта запаздывания взаимодействий в динамике кристаллов практически нет.

Следует отметить, что из-за полевой природы взаимодействия между частицами поле является полноценным компонентом системы. Таким образом, сама система взаимодействующих частиц не является замкнутой из-за наличия дополнительной неизбежной составляющей — поля с бесконечным набором степеней свободы.

Изучение динамики систем нескольких тел, погруженных в упругую среду с бесконечным набором степеней свободы, было начато в начале XX века в работах [6,7] (модель Лэмба с осциллятором, прикрепленным к бесконечной струне). Обобщение модели Лэмба на случай нелинейных осцилляторов и неоднородной струны было проведено в недавних работах [8,9]. Характерной особенностью поведения таких систем является затухание колебаний за счет необратимой передачи энергии осцилляторов в упругую среду. В работах [10–14] было исследовано несколько задач с учетом запаздывания взаимодействий и было показано, что во всех изученных моделях происходит необратимая передача энергии от частиц к полю, через которое частицы взаимодействуют.

Следует также отметить, что даже в случае конечного числа частиц набор степеней свободы генерируемого ими поля бесконечен. Эволюция системы в целом описывается уравнениями динамики частиц и уравнениями динамики поля. Эти уравнения инвариантны относительно обращения времени. В частности, полный набор решений уравнений для потенциалов электромагнитного поля содержит как запаздывающие, так и опережающие потенциалы. Однако обобщенные потенциалы не удовлетворяют фундаментальному принципу причинности и поэтому должны быть опущены при изучении динамики систем [15]. Таким образом, динамика системы частиц с полевым происхождением взаимодействий описывается функционально-дифференциальными уравнениями запаздывающего типа.

Подчеркнем, что общим свойством функционально-дифференциальных уравнений запаздывающего типа и их решений является неинвариантность по отношению к обращению времени, т.е. необратимость. Отметим также, что именно это свойство радикально отличает законы термодинамики от ньютоновских законов классической механики. Поэтому изучение динамики систем частиц с запаздывающими взаимодействиями между ними представляет интерес в связи с возможным последовательным микроскопическим обоснованием законов термодинамики на новой основе.

Данная работа посвящена изучению влияния запаздывания межатомных взаимодействий на динамику одномерной кристаллической решетки с целью нахождения микроскопического динамического обоснования механизма достижения термодинамического равновесия в системе частиц.

2. Свободные колебания цепочки с запаздывающими взаимодействиями между частицами

Рассмотрим одномерную систему одинаковых частиц, взаимодействующих друг с другом, равновесные положения которых образуют идеальную решетку с граничными условиями Борна — фон Кармана [1]

$$x_n^{(0)} = na \ \ (a = \text{const},\ x_{n+N}^{(0)} = x_n^{(0)},\ 1 \le n \le N), \tag{1}$$

где a — расстояние между ближайшими соседями решетки, N — общее количество частиц в системе.

Локальное значение потенциала поля, создаваемого всеми частицами в точке $x_n^{(0)}$ для мгновенных взаимодействий, имеет вид

$$\varphi\left(x_n^{(0)}\right) = \sum_{(n'=n)}^{n'} v\left(x_n^{(0)} - x_{n'}^{(0)}\right), \tag{2}$$

где $v(x)$ — энергия парного взаимодействия двух атомов, расположенных на расстоянии x друг от друга.

В этом случае динамика системы в гармоническом приближении описывается уравнениями [2]

$$m\ddot{U}_n(t) = \sum_{n'>0} v''(n')[U_{n-n'}(t) - 2U_n(t) + U_{n+n'}(t)], \tag{3}$$

где m — масса атома, $v''(n)$ — вторая производная функции $v(x)$ в точке $x = na$, $U_n(t)$ — смещение n-й частицы из положения равновесия:

$$U_n(t) = x_n(t) - x_n^{(0)},\ |U_n(t)| << a. \tag{4}$$

Известно, что решения уравнений динамики кристаллической решетки с мгновенными взаимодействиями в гармоническом приближении приводят к понятию фононов. Однако реальные взаимодействия между частицами всегда обладают свойством запаздывания из-за конечной скорости распространения взаимодействий. Это свойство приводит к радикальному изменению динамики даже в простейшем случае задачи с двумя телами, включая необратимое поведение системы [10,14].

Чтобы учесть эффект замедления взаимодействий между частицами одномерной решетки в уравнении (3), произведем замену

$$U_{n\pm n'}(t) \to U_{n\pm n'}(t - \tau(n'a)), \tag{5}$$

где $\tau(n'a)$ — время запаздывания взаимодействия между точками, расположенными на расстоянии $n'a$ друг от друга.

В силу условия (4) мы предполагаем, что запаздывание взаимодействий между каждой парой частиц зависит только от равновесных расстояний между ними. Поскольку запаздывание взаимодействия между точками пропорционально расстоянию между ними, имеем

$$\tau(n'a) = \frac{an'}{c} = \tau_1 n', \tag{6}$$

где c — скорость распространения взаимодействий между частицами, т.е. есть скорость света, τ_1 — время задержки взаимодействия между ближайшими соседями решетки.

Таким образом, уравнения динамики одномерной цепочки взаимодействующих частиц в гармонической модели с учетом замедления взаимодействий имеют следующий вид

$$\begin{cases} m\ddot{U}_n(t) = \sum_{n'>0} v''(n')[U_{n-n'}(t - n'\tau_1) - 2U_n(t) + U_{n+n'}(t - n'\tau_1)]; \\ U_{n+N}(t) = U_n(t). \end{cases} \tag{7}$$

Будем искать решение этой системы уравнений в виде

$$U_n(t) = Q_k(t) e^{ikna}, \tag{8}$$

где $Q_k(t)$ — нормальные координаты. Из граничных условий Борна—фон Кармана следует, что

$$k = 2\pi \frac{s}{aN} \tag{9}$$

(s — произвольное целое число) и

$$-\frac{\pi}{a} \le k < \frac{\pi}{a}. \tag{10}$$

Подставляя (8) в уравнения (7), получим

$$m\ddot{Q}_k(t) - \\ -\sum_{n'>0} v''(n')[Q_k(t - n'\tau_1) e^{-ikan'} - 2Q_k(t) + Q_k(t - n'\tau_1) e^{ikan'}] = 0. \tag{11}$$

Подстановка

$$Q_k(t) = q_k e^{-i\omega t} \tag{12}$$

позволяет получить уравнение для закона дисперсии $\omega(\tau_1, k)$:

$$m\omega^2(\tau_1, k) - 2\sum_{n'>0} v''(n')[1 - e^{i\omega(\tau_1,k)\tau_1 n'} \cos(kan')] = 0. \tag{13}$$

Это уравнение в общем случае (т.е. при $\tau_1 \ne 0$) является трансцендентным, а множество его корней бесконечно.

Для существования стационарных колебаний в системе необходимо, чтобы уравнение (13) имело хотя бы один действительный корень. Покажем, что при $\tau_1 = 0$ это уравнение не имеет действительных корней. Полагая

$$\omega(\tau_1,k) = \Omega(\tau_1,k) - i\Gamma(\tau_1,k), \tag{14}$$

сведем уравнение (13) относительно комплексной неизвестной $\omega(\tau_1,k)$ к системе уравнений относительно двух действительных неизвестных $\Omega(\tau_1,k)$ и $\Gamma(\tau_1,k)$:

$$\begin{cases} m\left[\Omega^2(\tau_1,k) - \Gamma^2(\tau_1,k)\right] - \\ -2\sum_{n'>0} v''(n')[1 - e^{\Gamma(\tau_1,k)\tau_1 n'}\cos(kan')\cos(\Omega(\tau_1,k)\tau_1 n')] = 0; \\ m\Omega(\tau_1,k)\Gamma(\tau_1,k) + \\ +\sum_{n'>0} v''(n')e^{\Gamma(\tau_1,k)\tau_1 n'}\cos(kan')\sin(\Omega(\tau_1,k)\tau_1 n') = 0. \end{cases} \tag{15}$$

Элементарный анализ показывает, что при $\tau_1 = 0$ функция $\Gamma(\tau_1,k)$ удовлетворяет условию

$$\Gamma(\tau_1,k) \equiv 0. \tag{16}$$

Следовательно, запаздывание взаимодействий приводит к невозможности стационарных свободных колебаний одномерной решетки. Поскольку эффект запаздывания неизбежен, в гармоническом приближении динамики решетки возможны только два сценария.

Если

$$\Gamma(\tau_1,k) > 0. \tag{17}$$

для всех значений k, тогда все колебания в системе затухают и при $t \to \infty$ колебания прекращаются.

Если существуют такие значения k, при которых

$$\Gamma(\tau_1,k) < 0. \tag{18}$$

тогда решетка распадается.

Перечислим корни характеристического уравнения (13) при условии, что $\tau_1 = 0$:

$$\omega_s(\tau_1,k) = \Omega_s(\tau_1,k) - i\Gamma_s(\tau_1,k),\ s = 1,2,\ldots \tag{19}$$

Для сохранения целостности решетки необходимо, чтобы условие (17) было выполнено для всех $\Gamma_s(\tau_1,k)$

$$\Gamma_s(\tau_1,k) > 0, \tag{20}$$

поэтому интерес представляет только этот случай.

Каждый из корней $\omega_s(\tau_1,k)$ соответствует уравнению свободных колебаний вида

$$\ddot{Q}_k^{(s)}(t) + 2\Gamma_s(\tau_1,k)\dot{Q}_k^{(s)}(t) + \\ + [\Omega_s^2(\tau_1,k) + \Gamma_s^2(\tau_1,k)]Q_k^{(s)}(t) = 0. \tag{21}$$

Эта форма уравнений будет использоваться ниже для изучения вынужденных колебаний решетки.

3. Динамика вынужденных колебаний цепочки с запаздывающими взаимодействиями

Рассмотрим задачу о динамике одномерной атомной цепочки, погруженной в переменное внешнее силовое поле. Обозначим внешнюю силу, действующую на нормальную координату $Q_k^{(s)}(t)$ через $f_k^{(s)}(t)$. Тогда уравнения динамики системы имеют вид:

$$\ddot{Q}_k^{(s)}(t) + 2\Gamma_s(\tau_1,k)\dot{Q}_k^{(s)}(t) + \\ + [\Omega_s^2(\tau_1,k) + \Gamma_s^2(\tau_1,k)]Q_k^{(s)}(t) = \frac{f_k^{(s)}(t)}{m}. \tag{22}$$

Представляет интерес случай (20), когда свободные колебания атомов в цепочке затухают, т. е. решетка не разрушается.

Из-за члена $\dot{Q}_k^{(s)}(t)$ это уравнение имеет тот же вид, что и уравнения вынужденных колебаний при трении. Однако, в отличие от феноменологических подходов, здесь затухание колебаний имеет микроскопическое чисто динамическое происхождение из-за конечной скорости передачи взаимодействий.

Общее решение уравнения (22) представляет собой сумму общего решения соответствующей однородной системы уравнений (которая, как показано в предыдущем разделе, стремится к нулю при $t \to \infty$) и частного решения уравнений неоднородной системы. Поэтому с течением времени в системе устанавливаются стационарные колебания, определяемые характеристиками внешнего поля.

Представим внешнюю силу в виде разложения Фурье

$$f_k^{(s)}(t) = \sum_{s'} C_k^{(ss')} e^{i\widetilde{\Omega}_{s'}t}. \tag{23}$$

Тогда решение уравнений (22) имеет вид [16]

$$Q_k^{(s)}(t) = \sum_{s'} \frac{C_k^{(ss')} e^{i\widetilde{\Omega}_{s'}t + i\delta_s(\tau_1,k)}}{m\sqrt{[\Omega_s^2(\tau_1,k) + \Gamma_s^2(\tau_1,k) - \widetilde{\Omega}_{s'}^2] + 4\Gamma_s^2(\tau_1,k)\widetilde{\Omega}_{s'}^2}}, \tag{24}$$

где

$$\tan\delta_s(\tau_1,k) = \frac{2\Gamma_s(\tau_1,k)\widetilde{\Omega}_{s'}}{\widetilde{\Omega}_s^2 - \Omega_s^2(\tau_1,k) - \Gamma_s^2(\tau_1,k)}. \tag{25}$$

Таким образом, в пределе $t \to \infty$ система переходит в стационарное состояние, находящееся в динамическом равновесии с внешним полем.

4. Результаты

В заключение перечислим основные результаты этой работы.

1. Показано, что запаздывание взаимодействий между частицами приводит к радикальной перестройке динамики одномерной гармонической цепочки. В частности, из-за запаздывания взаимодействий стационарные свободные колебания в цепочке невозможны.

2. Поскольку наличие свободных колебаний с возрастающими амплитудами означает разрушение цепочки, был получен критерий отсутствия нарастающих колебаний в системе. Этот критерий является условием стабильности цепочки.

3. Показано, что если устойчивая цепочка частиц с запаздывающими взаимодействиями между ними погружается в переменное внешнее поле, система переходит в стационарное состояние, которое зависит как от свойств системы, так и от характеристик внешнего поля. Это стационарное состояние было интерпретировано как динамическое равновесие между цепочкой и внешним полем.

Таким образом, в рамках динамики одномерной кристаллической решетки с запаздывающими взаимодействиями между частицами имеют место следующие явления:

— феномен необратимости;

— существование термодинамического равновесия.

Оба эти явления являются постулатами как в феноменологической термодинамике, так и в статистической механике как нулевой закон термодинамики. Результаты этой работы показывают, что нулевой закон термодинамики может быть обоснован, объяснен и описан на основе двух фундаментальных физических принципов: полевой характер взаимодействия между частицами и принцип причинно-следственной связи.

---

1. Born M., von Karman T. Über Schwingungen im Raumgittern. Physikalische Zeitschrift, 1912, vol. 13(8), pp. 297–309.
2. Born M., Huang K. Dynamical Theory of Crystal Lattices. Oxford: Clarendon Press, 1954.
3. Brillouin L. Wave Propagation in Periodic Structures: Electric Filters and Crystal Lattices. N.Y., Dover Publications Publ., USA, 1953.
4. Maradudin A.A., Montroll E.W., Weiss G.H., Ipatova I.P. Theory of Lattice Dynamics in the Harmonic Approximation. N.Y., Academic Press Publ., USA, 1971.
5. Kosevich A.M. The Crystal Lattice: Phonons, Solitons, Dislocations, Superlattices. Weinheim, Wiley-VCH Verlag Publ., 2005.
6. Lamb H. On a peculiarity of the wave-system due to the free vibrations of a nucleus in an extended medium. Proc. London Math. Soc., 1900, vol. s1-32(1), pp. 208–211.
7. Love A.E.H. Some illustrations of modes of decay of vibratory motions. Proc. London Math. Soc., 1905, vol. s2-2(1), pp. 88–113.
8. Jahan A. The Lamb problem with a nonuniform string. Physics Letters A, 2021, vol. 392, pp. 127–133.
9. Jahan A. The Lamb problem with a nonuniform string II: Perturbative Solutions. Physics Letters A, 2021, vol. 400, 127320.
10. Synge J.L. The electromagnetic two-body problem. Proc. Roy. Soc. A, 1940, vol. 177(968), pp. 118–139.
11. Driver R.D. A two-body problem of classical electrodynamics: The one-dimensional case. Ann. Physics, 1963, vol.21(1), pp. 122–142.
12. Hsing D.K. Existence and uniqueness theorem for the one-dimensional backwards Two-body problem of electrodynamics. Physic Rev. D, 1977, vol. 16(04), pp. 974–982.
13. Hoag J.T., Driver R.D. A delayed-advanced model for the electrodynamics two-body problem. Nonlinear Analysis: Theory, Methods & Applications, 1990, vol. 15(2), pp. 165–184.
14. Zakharov A.Yu. On physical principles and mathematical mechanisms of the phenomenon of irreversibility. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 2019, vol. 525, pp. 1289–1295.
15. Zakharov A.Yu. Probability-free relativistic kinetic theory of classical systems of charged particles. Journal of Physics: Conference Series, 2020, vol. 1658(1), 012076.
16. Landau L.D., Lifshitz E.M. Mechanics. Amsterdam, Elsevier Publ., Netherlands, 2007.