РЕШЕНИЕ НЕСТАЦИОНАРНОЙ ЗАДАЧИ О МЕХАНИЧЕСКИХ КОЛЕБАНИЯХ ОДНОМЕРНОЙ ЦЕПОЧКИ УПРУГО СВЯЗАННЫХ ЧАСТИЦ ПРИ НАЛИЧИИ ИЗОБАРИЧЕСКОГО ДЕФЕКТА

В. В. Мажуга (Москва)

Одномерная цепочка упруго связанных частиц является простейшей моделью для изучения статистическо-динамических свойств твердых тел. Шредингер [1] получил аналитическое решение нестационарной задачи колебаний однородной цепочки и рассмотрел переход от механики системы дискретных точек к механике сплошной среды.

Временная зависимость движения линейной цепочки при наличии изотопического дефекта (примесная частица отличается только массой от основной частицы) была исследована в работе Кашивамуры [2]. При помощи метода производящей функции он получил интегральные уравнения движения частиц цепочки, которые решал посредством итераций, и затем ему удалось просуммировать получающиеся ряды. Ввиду громоздкости формул этим методом практически невозможно рассмотреть нестационарные задачи колебаний цепочки с другими типами дефектов, например, случай наличия в цепочке изобарического дефекта (примесная частица отличается от основной только своим взаимодействием с соседями), молекулярной примеси и т. д. В данной работе получено решение нестационарной задачи колебаний цепочки при наличии изобарического дефекта.

§ 1. Исследуем задачу о продольных колебаниях неограниченной цепочки, состоящей из частиц массы M, расположенных вдоль прямой и находящихся в состоянии равновесия на равных расстояниях одна от другой. Взаимодействие частиц рассматривается в гармоническом приближении. Силовую постоянную цепочки будем обозначать через K. В цепочке один узел (нулевой) занят частицей, взаимодействие которой описывается силовой константой K_0 и отлично от взаимодействия между остальными частицами.

Система уравнений, описывающая движение частиц, имеет следующий вид:

$$r_i^{\cdot\cdot}(t) = [K + (K_0 - K)(\delta_{i,0} + \delta_{i,-1})](r_{i+1} - r_i) - [K + (K_0 - K)(\delta_{i,0} + \delta_{i,1})](r_i - r_{i-1}) \tag{1.1}$$

где r_i ($i = 0, \pm 1, \pm 2 \ldots$) — отклонение от положения равновесия i-й частицы, δ_{in} — символ Кронекера.

Начальные условия записываются в виде

$$r_i(0) = a_i, \quad r_i^{\cdot}(0) = v_i \tag{1.2}$$

Вводя безразмерное время τ, получим

$$4r_i^{\cdot\cdot}(\tau) = [1 + (\beta - 1)(\delta_{i,0} + \delta_{i,-1})](r_{i+1} - r_i) - [1 + (\beta - 1)(\delta_{i,0} + \delta_{i,1})](r_i - r_{i-1})$$

$$r_i(0) = a_i, \quad r_i^{\cdot}(0) = v / \omega_L \; (\tau = 2(K / M)^{1/2} t = \omega_L t, \quad \beta = K_0 / K) \tag{1.3}$$

Решение этой системы линейных дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами можно искать в виде

$$r_i(\tau) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} \left[a_j \Phi_i(j, \tau) + \frac{v}{\omega_L} \int_0^{\tau} \Phi_i(j, \tau')\, d\tau' \right] \tag{1.4}$$

Задача сводится к определению функции $\Phi_i(j, \tau)$.

Таким образом, будем решать систему уравнений (1.3) с начальными условиями

$$r_i(0) = a_i, \quad r_i^{\cdot}(0) = 0 \tag{1.5}$$

§ 2. Задачу решаем при помощи метода преобразования Лапласа. Если обозначить через $x_i(p)$ изображение функции $r_i(\tau)$, то нетрудно найти

$$[1 + (\beta - 1)(\delta_{i,0} + \delta_{i,-1})][x_{i+1}(p) - x_i(p)] - \tag{2.1}$$
$$- [1 + (\beta - 1)(\delta_{i,0} + \delta_{i,1})][x_i(p) - x_{i-1}(p)] - 4p^2 x_i(p) + 4pa_i = 0$$

Рассмотрим уравнения системы (2.1) при $i = 2, 3, 4 \ldots$.

$$x_{i+1} - (4p^2 + 2)x_i + x_{i-1} + 4pa_i = 0 \tag{2.2}$$

Уравнение (2.2) представляет собою неоднородное разностное уравнение и его решение таково [3]

$$x_i = \varphi_1^{-1} \left(\varphi_{i-1} x_2 - \varphi_{i-2} x_1 + 4p \sum_{\nu=2}^{i-1} \varphi_{\nu-1} a_{i+1-\nu} \right)$$

$$\varphi_i = (\sqrt{p^2 + 1} + p)^{2i} - (\sqrt{p^2 + 1} - p)^{2i} \tag{2.3}$$

Для x_i с отрицательными значениями индекса i справедливо аналогичное соотношение

$$x_k = \varphi_1^{-1}\left(\varphi_{-k-1}x_{-2} - \varphi_{-k-2}x_{-1} + 4p\sum_{\nu=-2}^{k+1}\varphi_{-\nu-1}a_{k-1-\nu}\right) \tag{2.4}$$

Здесь отрицательные значения номеров частиц обозначены индексом k.

Используя уравнения системы (2.1) при $i = -1, 0, 1$ и соотношения (2.3), (2.4), после несложных алгебраических преобразований находим

$$(4p^2 + 2\beta)x_0 = \beta\sigma_{i-1}^{-1}\left(\beta\varphi_{i-1}x_0 + \varphi_1 x_i + 4p\sum_{\nu=2}^{i}\varphi_{\nu-1}a_{i+1-\nu}\right) +$$

$$+ \beta\sigma_{-k-1}^{-1}\left(\beta\varphi_{-k-1}x_0 + \varphi_1 x_k + 4p\sum_{\nu=-2}^{k}\varphi_{-\nu-1}a_{k-1-\nu}\right) + 4pa_0$$

$$\sigma_i = [(4p^2 + \beta + 1)\varphi_i - \varphi_{i-1}] \tag{2.5}$$

Переходя в (2.5) к пределу при $i \to \infty$ и $k \to -\infty$, получим $x_0(p)$

$$x_0(p) = \frac{1}{\Delta}\left[\beta\sum_{j=-\infty}^{\infty}(\sqrt{p^2+1} - p)^{2|j|}a_j + 2(1-\beta)p(\sqrt{p^2+1} - p)a_0\right]$$

$$\Delta = \beta\sqrt{p^2+1} + (\beta - 1)p[(\sqrt{p^2+1} - p)^2 - 1] \tag{2.6}$$

Нахождение $r_0(\tau)$ сводится к вычислению контурного интеграла

$$r_0(\tau) = \frac{1}{2\pi i}\int_{a-i\infty}^{a+i\infty} x_0(p)e^{p\tau}\,dp \tag{2.7}$$

где a — постоянная, бо́льшая чем действительная часть любой особенности $x_0(p)$.

Контурный интеграл (2.7) можно выразить через функции Ломмеля, Бесселя и тригонометрические функции [4]. Функции Ломмеля от двух независимых переменных определяются соотношением [1]

$$U_\nu(y, z) = \sum_{m=0}^{\infty}(-1)^m\left(\frac{y}{z}\right)^{\nu+2m}J_{\nu+2m}(z) \tag{2.8}$$

Производя в (2.7) замену переменных по формуле $w = p - \sqrt{p^2+1}$, имеем

$$r_0(\tau) = \frac{1}{2\pi i}\int_l x_0(w)\exp\left[\frac{\tau}{2}\left(w - \frac{1}{w}\right)\right]dw \tag{2.9}$$

$$x_0(w) = \frac{1+w^2}{w[(3\beta-2)w^2+1]}\left\{\beta\sum_{j=-\infty}^{\infty}w^{2|j|}a_j + (\beta-1)(w^2-1)a_0\right\}$$

В качестве контура l можно взять любую окружность, охватывающую начало координат $w = 0$ и не охватывающую полюсов подынтегральной функции. Здесь предполагается, что начало координат обходится в положительном направлении.

Представим функцию $x_0(w)$ в виде суммы дробей

$$x_0(w) = \frac{A_{00}}{w} + \sum_{n=1}^{\infty}\sum_{k=1}^{2}\frac{A_{nk}w^{2n+1}}{w^2 - w_k}, \qquad w_{1,2} = \frac{2-3\beta\pm\gamma}{2-2\beta}$$

$$\gamma = (9\beta^2 - 8\beta)^{1/2} \tag{2.10}$$

---

[1] Таблицы функций Ломмеля см. [5].

Интеграл (2.9) распадается на сумму интегралов вида

$$I_1 = \frac{1}{2\pi i}\int_l w^{-1}\exp\left[\frac{\tau}{2}\left(w-\frac{1}{w}\right)\right]dw \tag{2.11}$$

$$I_2 = \frac{1}{2\pi i}\int_l \frac{w^{2n+1}}{w^2-w_k}\exp\left[\frac{\tau}{2}\left(w-\frac{1}{w}\right)\right]dw \tag{2.12}$$

Интеграл (2.11) есть функция Бесселя $J_0(\tau)$ порядка нуль [6].

Разлагая в ряд знаменатель в (2.12), легко показать, что при $\beta < 1$ интеграл (2.12) равен

$$I_2 = (-w_k)^n U_{2n+2}\left[\left(-\frac{1}{w_k}\right)^{1/2}\tau, \tau\right] \tag{2.13}$$

При $\beta > 1$ получаем

$$I_2 = (-w_k)^n U_{-2n+2}[(-w_k)^{1/2}\tau, \tau] - w_k^n \cos\omega_0\tau \tag{2.14}$$

$$\omega_0 = \left(\frac{2\beta}{4-3\beta+\gamma}\right)^{1/2}$$

Вычисляя последовательно все интегралы, после несложных алгебраических преобразований получаем $r_0(\tau)$. Введем обозначения

$$A = \frac{\beta-\gamma}{\gamma}\delta_{j,0} + \frac{\beta(\alpha^2-1)}{\alpha^{2|j|-2|\theta(j)|+2}\gamma}(1-\delta_{j,0}), \quad \alpha = \left(-\frac{1}{w_1}\right)^{1/2}$$

$$B = \frac{\beta+\gamma}{\gamma}\delta_{j,0} + \frac{\beta(\delta^2-1)}{\delta^{2|j|-2|\theta(j)|+2}\gamma}(1-\delta_{j,0}), \quad \delta = \left(-\frac{1}{w_2}\right)^{1/2} \tag{2.15}$$

$$\theta(j) = 1\ (j \geqslant 1), \quad \theta(j) = 0\ (j = 0), \quad \theta(j) = -1\ (j \leqslant 1)$$

Тогда с учетом (1.4) решение можно представить в следующем виде:

при $\beta > 1$

$$\Phi_0(j,\tau) = J_0(\tau)\delta_{j,0} + (-1)^{|j|-\theta(j)|+1}A\cos\omega_0\tau + AU_{2|\theta(j)|-2|j|}(\alpha^{-1}\tau,\tau) - BU_{2|j|-2|\theta(j)|+2}(\delta\tau,\tau) \tag{2.16}$$

при $\beta < 1$

$$\Phi_0(j,\tau) = J_0(\tau)\delta_{j,0} + AU_{2|j|-2|\theta(j)|+2}(\alpha\tau,\tau) - BU_{2|j|-2|\theta(j)|+2}(\delta\tau,\tau) \tag{2.17}$$

Для случая $\beta = 1$ решение было получено ранее [1].

Теперь перейдем к нахождению $r_i(\tau)$ при $i \neq 0$. Подставляя x_2 из соотношения (2.3) в уравнение системы (2.1) при $i = 1$ и x_{-2} из соотношения (2.4) в уравнение системы (2.1) при $i = -1$, имеем

$$x_1 = \sigma_{i-1}^{-1}\left(\beta\varphi_{i-1}x_0 + \varphi_1 x_i + 4p\sum_{\nu=2}^{i}\varphi_{\nu-1}a_{i+1-\nu}\right) \tag{2.18}$$

$$x_{-1} = \sigma_{-k-1}^{-1}\left(\beta\varphi_{-k+1}x_0 + \varphi_1 x_k + 4p\sum_{\nu=-2}^{k}\varphi_{-\nu-1}a_{k-1-\nu}\right) \tag{2.19}$$

Вычитая из (2.18) (2.19) и переходя к пределу при $i \to \infty$ и $k \to -\infty$, получим

$$x_1(p) - x_{-1}(p) = \frac{4p}{1+(\beta-1)(\sqrt{p^2+1}-p)^2}\sum_{j=-\infty}^{\infty}\theta(j)(\sqrt{p^2+1}-p)^{2|j|}a_j \tag{2.20}$$

Используя уравнение системы (2.1) при $i = 0$ и (2.20), находим изображения $x_1(p)$ и $x_{-1}(p)$, а затем из (2.18) и (2.19) получаем $x_i(p)$ и $x_k(p)$.

Оригинал находим методом, изложенным при нахождении оригинала $x_0(p)$. Приводим окончательный результат, используя обозначение (1.4).

Если $\beta > 2$, то

$$\Phi_i(j,\tau) = \Psi_i(j,\tau) + (-1)^{|i|+|j|}C\cos\omega_0\tau + (-1)^{|i|+|j|}E\theta(i)\theta(j)\cos\omega_1\tau + CU_{2-2|i|-2|j|}(\alpha^{-1}\tau,\tau) + E\theta(i)\theta(j)U_{2-2|i|-2|j|}(\varepsilon^{-1}\tau,\tau) \tag{2.21}$$

Здесь

$$\Psi_i(j,\tau) = J_{2|i-j|}(\tau) - J_{2|i|+|2j-\theta(j)|-2}(\tau) + \tag{2.22}$$

$$+\frac{1}{2}[1-\delta_{j,0}+\theta(i)\theta(j)][(1-\beta)J_{2|i|+2|j|-2}(\tau)+J_{2|i|+2|j|-4}(\tau)] + DU_{2|i|+2|j|}(\delta\tau,\tau)$$

$$C = \frac{\beta(\alpha^2-1)}{\alpha^{2|i|}\gamma}\delta_{j,0} + \frac{2\beta^2-3\beta^3-\beta^2\gamma+2\beta\gamma}{4\alpha^{2|i|+2|j|-2}\gamma(1-\beta)}(1-\delta_{j,0})$$

$$D = \frac{\beta(1-\delta^2)}{\delta^{2|i|}\gamma}\delta_{j,0} + \frac{3\beta^3-2\beta^2-\beta^2\gamma+2\beta\gamma}{4\delta^{2|i|+2|j|-2}\gamma(1-\beta)}(1-\delta_{j,0})$$

$$E = \frac{\beta^2-2\beta}{2(\beta-1)^{|i|+|j|}}, \quad \varepsilon = (\beta-1)^{1/2}, \quad \omega_1 = \frac{\beta}{2\sqrt{\beta-1}}$$

При $1 < \beta \leqslant 2$ решение имеет вид

$$\Phi_i(j,\tau) = \Psi_i(j,\tau) + (-1)^{|i|+|j|}C\cos\omega_0\tau +$$

$$+ CU_{2-2|i|-2|j|}(\alpha^{-1}\tau,\tau) + E\theta(i)\theta(j)U_{2|i|+2|j|}(\varepsilon\tau,\tau) \tag{2.23}$$

В случае $\beta < 1$ находим

$$\Phi_i(j,\tau) = \Psi_i(j,\tau) + CU_{2|i|+2|j|}(\alpha\tau,\tau) + E\theta(i)\theta(j)U_{2|i|+2|j|}(\varepsilon\tau,\tau) \tag{2.24}$$

При $\beta = 1$ решение было получено ранее [1].

§ 3. *Пример*. Исследуем статистическо-динамические свойства цепочки с изобарическим дефектом. Пусть в начальный момент времени $t=0$ скорость i-й частицы имеет заданное значение $v_i(0)$, а скорости остальных частиц являются случайными величинами с каноническим распределением. Рассмотрим установление максвелловского распределения в данной цепочке. Чтобы исследовать приближение к равновесному значению скорости отдельной частицы цепочки, необходимо найти распределение условной вероятности скорости этой частицы, определяемой соотношением

$$P[v_i(t) \mid v_i(0)] = \frac{W_2[v_i(t) \mid v_i(0)]}{W_1(v_i)} \tag{3.1}$$

Здесь $W_i(v_i)$ означает плотность вероятности для значения v_i оказаться в интервале v_i, $v_i + dv_i$; $W_2[v_i(t) \mid v_i(0)]$ означает совместную плотность вероятности для значения v_i оказаться в интервале $v_i(t)$, $v_i(t) + dv_i(t)$ в момент времени t и в интервале $v_i(0)$, $v_i(0) + dv_i(0)$ в момент времени 0. Можно показать [2], что $P[v_i(t) \mid v_i(0)]$ имеет вид

$$P[v_i(t) \mid v_i(0)] = \{2\pi\langle v_i^2\rangle[1-\Phi_i^2(i,t)]\}^{-1/2}\exp\left\{-\frac{[v_i(t)-\Phi_i(i,t)v_i(0)]^2}{2\langle v_i^2\rangle[1-\Phi_i(i,t)]}\right\} \tag{3.2}$$

Здесь угловые скобки означают среднее по каноническому ансамблю.

Из (3.2) следует, что поведение $P[v_i(t)|v_i(0)]$ определяется поведением $\Phi_i(i,t)$. Нетрудно показать, что в полученных формулах для $\Phi_i(i,\tau)$ (заметим, что $\tau = \omega_L t$) все слагаемые при $\tau \to \infty$ стремятся к нулю, кроме слагаемых, содержащих косинус. Эти слагаемые отвечают локальным колебаниям. Следовательно, в системе устанавливается максвелловское распределение только при $\beta \leqslant 1$. В остальных случаях функция распределения условной вероятности не приближается к максвелловскому распределению, а зависит от исходной величины $v_i(0)$ и имеет периодический характер.

Таким образом, в гармоническом приближении при наличии локальных колебаний в цепочке не происходит равнораспределения энергии по всем частицам. Аналогичный результат получен Кашивамурой [2] для цепочки с изотопическим дефектом.

Поступила 16 XII 1968

ЛИТЕРАТУРА

1. Schrödinger E. Zur Dynamik elastish dekoppelter Punktsysteme. Ann. Physik, 1914, Bd. 44, S. 916.
2. Kashiwamura S. Statistical dynamical behaviors of a one-dimensional lattice with isotopic impurity. Progr. Theoret. Phys., 1962, vol. 27, No. 3, p. 571.
3. Дёч Г. Руководство к практическому применению преобразования Лапласа. М., «Наука», 1965, стр. 139.
4. Кузнецов П. И. О представлении одного контурного интеграла. ПММ, 1947, т. 11, вып. 2.
5. Деканосидзе Е. Н. Таблицы цилиндрических функций от двух переменных. М., Изд-во АН СССР, 1956.
6. Ватсон Г. И. Теория бесселевых функций. М., Изд-во иностр. лит., 1949.