

**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](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](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 пол-

ноценным 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]

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

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

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

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]

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

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:

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

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

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

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

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

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

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

Будем искать решение этой системы уравнений в виде

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

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

$$k = 2\pi \frac{s}{aN} \quad (9)$$

(s — произвольное целое число) и

$$-\frac{\pi}{a} \leq k < \frac{\pi}{a}. \quad (10)$$

Подставляя (8) в уравнения (7), получим

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

Подстановка

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

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

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

Это уравнение в общем случае (т.е. при $\tau_1 \neq 0$) 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

$$\omega(\tau_1, k) = \Omega(\tau_1, k) - i\Gamma(\tau_1, k), \quad (14)$$

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

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

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

$$\Gamma(\tau_1, k) \equiv 0. \quad (16)$$

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

$$\Gamma(\tau_1, k) > 0, \quad (17)$$

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

Если существуют такие значения k , при которых

$$\Gamma(\tau_1, k) < 0, \quad (18)$$

тогда решетка распадается.

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

$$\omega_s(\tau_1, k) = \Omega_s(\tau_1, k) - i\Gamma_s(\tau_1, k), \quad s = 1, 2, \dots \quad (19)$$

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

$$\Gamma_s(\tau_1, k) > 0, \quad (20)$$

поэтому интерес представляет только этот случай.

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

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

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:

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

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 $t \rightarrow \infty$) 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

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

Тогда решение уравнений (22) имеет вид [16]

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

где

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

Таким образом, в пределе $t \rightarrow \infty$ 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.