

О ДИССИПАЦИИ ЭНЕРГИИ В ЦЕПОЧКЕ СВЯЗАННЫХ
ГАРМОНИЧЕСКИХ ОСЦИЛЛЯТОРОВ

А. С. Долгов

(Харьков)

Рассматривается развитие процессов в цепочках связанных осцилляторов после начального толчка, сообщенного какому-либо из атомов. Рассмотрение подчинено анализу очевидных недостатков одномерных цепочек связанных гармонических осцилляторов и тех последствий, к которым приведет их учет. Анализируется влияние на распространение волн столкновений в одномерной цепочке атомов диссипативных потерь энергии и поперечных колебаний. Разумеется, имеет смысл говорить только о малых поперечных смещениях атомов цепочки, так как в противоположном случае несостоятельность простейших моделей очевидна.

При теоретическом изучении взаимодействия атомов с кристаллическими поверхностями выявляются два различных подхода. Во-первых, делаются попытки исследования расчетных схем, максимально приближенных к некоторой конкретной физической ситуации (реалистическая форма потенциалов взаимодействия, трехмерность, конкретный вид симметрии решетки и т. д. (например, [1])). Во-вторых, проводятся исследования, основанные на использовании модельных представлений и соответствующей аналитической техники [2-4]. Пионерские разработки в этом направлении проведены Френкелем [5]. В настоящее время наиболее часто процесс столкновения атома с поверхностью моделируется взаимодействием атома с линейной цепочкой осцилляторов, каждый из которых связан гармоническими силами с ближайшими соседями.

Предположим, что в начальный момент какой-то из ранее покоившихся атомов двумерной среды (будем называть его нулевым) получает начальное смещение относительно положения равновесия. Имея в виду малость рассматриваемых смещений и то обстоятельство, что малые поперечные и продольные колебания взаимодействуют слабо, а также учитывая уменьшение экстремальных значений смещений по мере увеличения удаленности от нулевого атома, рассмотрим процессы в двух бесконечных рядах атомов, которые пересекаются под прямым углом в положении равновесия нулевого атома. Таким образом, нулевой атом является единственным атомом, принадлежащим обоим цепочкам. Для бесконечной среды имеем следующую систему уравнений:

$$\begin{aligned}
 Mx_n''(t) &= K(x_{n-1} - 2x_n + x_{n+1}) - \\
 &- K\left(\delta_{1n} \frac{y_0^2}{l} - \delta_{-1n} \frac{y_0^2}{l} + 2 \frac{x_0^3}{l^2} \delta_{0n}\right) \quad (-\infty < n < \infty)
 \end{aligned}
 \tag{1}$$

$$\begin{aligned}
 My_k''(t) &= K(y_{k-1} - 2y_k + y_{k+1}) - \\
 &- K\left(\delta_{1k} \frac{x_0^2}{l} - \delta_{-1k} \frac{x_0^2}{l} + 2 \frac{y_0^3}{l^2} \delta_{0k}\right) \quad (-\infty < k < \infty)
 \end{aligned}
 \tag{2}$$

Здесь M — масса атома; n, k — порядковые номера атомов в «горизонтальном» и «вертикальном» направлениях соответственно; x, y — смещения атомов; K — силовая константа взаимодействия между атомами; δ — символ Кронекера; l — межатомное расстояние, которое для простоты считается одним и тем же в обоих направлениях.

Для производящей функции

$$G_x(s, \tau) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} x_n(\tau) s^{2n}, \quad \tau = 2(K/M)^{1/2} t$$

аналогом системы (1) является уравнение

$$\frac{d^2 G_x}{d\tau^2} = \frac{1}{4} \left(s - \frac{1}{s} \right)^2 G_x - \frac{1}{4l} \left(s^2 - \frac{1}{s^2} \right) y_0^2 - \frac{x_0^3}{2l^2} \quad (3)$$

Сходным образом переписываются уравнения (2). Из (3) получаем

$$\begin{aligned} x_n(\tau) = & x_0(0) J_{2n}(\tau) - \frac{1}{2l} \int_0^\tau y_0^2(u) [J_{2n-1} - J_{2n+1}](\tau - u) du - \\ & - \frac{1}{l^2} \int_0^\tau \sum_{m=0}^{\infty} J_{2n+2m+1}(\tau - u) x_0^3(u) du \end{aligned} \quad (4)$$

где J_i — функция Бесселя i -го порядка. Соотношение (4) описывает смещения всех атомов горизонтального ряда. Для x -й составляющей движения нулевого атома соотношение (4) дает нелинейное интегральное уравнение типа Вольтерра

$$x_0(\tau) = x_0(0) J_0(\tau) - \frac{1}{l^2} \int_0^\tau \sum_{m=0}^{\infty} J_{2m+1}(\tau - u) x_0^3(u) du \quad (5)$$

Это значит, что с точностью до членов третьего относительно $y_0 l^{-1}$ порядка малости x -е движение нулевого атома не зависит от величины проекций смещений на вертикальную ось. Влияние поперечных связей учитывается вторым слагаемым правой части (5).

Первая итерация уравнения (5) дает

$$\begin{aligned} x_0(\tau) = & x_0(0) J_0(\tau) - \frac{x_0^3(0)}{l^2} \left\{ [1 + 2J_0(\tau) - J_0^2(\tau)] \sin^2 \frac{\tau}{2} - \right. \\ & \left. - [1 - J_0(\tau)] \tau J_1(\tau) - \tau \sin \tau \right\} \end{aligned} \quad (6)$$

Первое слагаемое в фигурных скобках (6) ограничено, второе растет $\sim \tau^{1/2}$, третье — как τ . Если воспользоваться асимптотической формулой для функции J_0 , то легко установить, что последний член формулы (6) при больших τ тормозит затухание колебаний нулевого атома.

Подстановкой зависимостей $x_0(\tau)$ и $y_0(\tau)$ в формулу (4) находится временной ход x -х смещений атомов с $|n| > 0$. Поперечное движение нулевого атома здесь более существенно, чем для x -х колебаний самого нулевого атома. Так как структура последнего слагаемого формулы (4) при $n \neq 0$ та же, что и в уравнении (5), и в связи с тем, что третье слагаемое (4) более высокого порядка малости относительно величины начального смещения чем второе, рассмотрим только роль второго слагаемого (4), описывающего влияние поперечных колебаний нулевого атома на продольные смещения атомов горизонтального ряда. Получим

$$\begin{aligned} x_n(\tau) = & x_0(0) J_{2n}(\tau) - \frac{y_0^2(0)}{l} \left\{ [1 - J_0(\tau)] J_{2n}(\tau) - \right. \\ & \left. - 2 \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m J_{2n+2m+2}(\tau) \right\} \end{aligned} \quad (7)$$

Можно видеть, что начальный поперечный сдвиг нулевого атома приводит к существенным изменениям в продольных колебаниях только при достаточно больших значениях τ . Начальный всплеск колебаний n -го атома при $\tau \approx 2n$ практически не зависит от поперечных колебаний (если, конечно, $x_0(0) \gg y_0(0)$). Отметим также, что поперечные колебания нулевого атома, начиная с некоторого значения τ , задают атомам с $|n| > 0$ некоторый фон колебаний, амплитуда которых порядка $y_0^2 l^{-1}$. Например, для $n = 1$ формула (7) соответствует выражению

$$x_1(\tau) = x_0(0) J_2(\tau) + \frac{y_0^2(0)}{l} \{\cos - J_0 + J_2 + J_0 J_2\}(\tau) \quad (8)$$

Очевидно, что формулы для смещений атомов вертикального ряда, в том числе для $y_0(\tau)$, можно получить, если в формулах (4) — (8) переставить местами x_i и y_i .

Выше предполагалось, что ряды атомов неограничены в обе стороны. Роль границ изучалась в ряде работ (например, [4-6]). Поэтому ограничимся указанием, что если нулевой, т. е. первично смещенный, атом находится на поверхности, то проводимое рассмотрение будет анализом взаимодействия продольной волны, распространяющейся от поверхности в глубь среды, и волны, распространяющейся в поверхностном слое твердого тела.

В принятых выше обозначениях подлежащая анализу система уравнений для цепочки с трением записывается в следующем виде:

$$x_n''(\tau) = 1/4(x_{n-1} - 2x_n + x_{n+1})(\tau) - 1/2\gamma x_n'(\tau) \quad (-\infty < n < \infty) \quad (9)$$

где γ характеризует величину сил трения. Осуществляя подстановку

$$x_n(\tau) = U_n(\tau) e^{-1/4\gamma\tau} \quad (10)$$

и подвергая систему (9) преобразованию Лапласа, получаем систему алгебраических уравнений

$$\varphi_{n-1}(p) - (4p^2 + 2 - 1/4\gamma^2)\varphi_n(p) + \varphi_{n+1}(p) + 4px_0(0)\delta_{n0} = 0 \quad (11)$$

Здесь $\varphi_n(p)$ — образ функции $U_n(\tau)$, определяемой согласно (10). Предполагается для упрощения записи, что скорости всех атомов в начальный момент равны нулю, а начальное смещение получает только нулевой атом.

Система уравнений (11) дает

$$G(p, s) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \varphi_n(p) s^n = - \frac{4px_0(0)}{s - (4p^2 + 2 - 1/4\gamma^2) + s^{-1}} \quad (12)$$

Разложив (12) по положительным и отрицательным степеням s и выполнив обращение преобразования Лапласа, находим

$$U_n(\tau) = x_0(0) \sum_{m=0}^{\infty} \left(\frac{\tau}{2}\right)^{2n+2m} \frac{1}{(2n+2m)!} \sum_{i=0}^m \frac{(n+m)! a^{m-i}}{(m-i)! (1/2 i + n)! 1/2 i!} \quad (13)$$

$$a = 1/4\gamma^2 - 2, \quad n \geq 0$$

Внутреннее суммирование в формуле (13) производится только по четным значениям индекса.

Легко убедиться, что при $a = -2$, т. е. когда в уравнениях (9) отсутствуют диссипативные члены

$$x_n(\tau) = x_0(0) J_{2n}(\tau) \quad (14)$$

как и должно быть.

Другой показательный частный случай соответствует $a = 2$, т. е. $\gamma = 4$ (сильное трение). При этом

$$x_n(\tau) = x_0(0) e^{-\tau} I_{2n}(\tau) \quad (15)$$

где I_{2n} — функция Бесселя от мнимого аргумента порядка $2n$.

Таким образом, в последнем случае $x_0(\tau)$, приближаясь в вязкой среде к положению равновесия, не изменяет знака. Подобным же образом ведут себя и атомы с $n > 0$, причем атомы с номерами выше второго уже практически не «реагируют» на начальный сдвиг нулевого атома. Примечательно, что экстремальные значения $x_0(\tau)$ для больших τ при отсутствии трения всего лишь вдвое превышают $x_0(\tau)$ для тех же значений τ в случае, описываемом формулой (15). Это объясняется, видимо, «медленностью» процессов в системе с «сильным» трением.

Весьма простой вид формула (13) приобретает, когда $\gamma = \sqrt{8}$. Получается

$$x_0(\tau) = x_0(0) \sum_{m=0}^{\infty} \left(\frac{\tau}{2}\right)^{4m} \frac{2m!}{4m!(m!)^2} \exp \frac{-\sqrt{2}\tau}{2} \quad (16)$$

Формула (16), как и формула (15), соответствует довольно сильному трению, и поэтому здесь x_0 изменяется со временем сходным с (15) образом.

Если предполагать, что $\gamma \ll 1$, то можно решение системы (9) представить в таком виде:

$$x_n(\tau) = x_0(0) \left\{ J_{2n}(\tau) + \frac{1}{8} \gamma^2 \tau \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k J_{2n+2k+1}(\tau) \right\} \exp -\gamma\tau/4 \quad (17)$$

Здесь решение состоит из невозмущенной части и добавки, роль которой растет со временем. При $n = 0$ формула (17) становится особенно наглядной

$$x_0(\tau) = x_0(0) \left\{ J_0(\tau) + \frac{1}{16} \gamma^2 \tau \sin \tau \right\} e^{-1/4 \gamma \tau} \quad (18)$$

Итак, вместе с затуханием первого слагаемого формул (17) и (18) идет возрастание добавки. Можно убедиться, что для достаточно малого γ и достаточно больших τ роль второго слагаемого сводится в конечном счете к торможению спадания $x_0(\tau)$ сравнительно с $J_{2n}(\tau) \exp(-1/4 \gamma \tau)$.

Легко оценить диапазон расстояний от первично возбужденного атома, где смещения сравнимы с начальным смещением нулевого атома. Если считать, что указанный диапазон соответствует распространению волн по цепочке во временном интервале, ограниченном условием

$$\frac{1}{4} \gamma \tau \lesssim 2 \quad (19)$$

то очевидно, что значительные смещения получают атомы внутри области

$$|n| \lesssim \frac{1}{4} \gamma^{-1} R_{2n} \quad (20)$$

где R_{2n} определяет порядок экстремальных значений J_{2n} при τ порядка $2n$. Отметим, что область применимости формул (17), (18) практически не отличается от области, ограниченной условиями (19), (20). Если $\gamma \lesssim 0.1$, то амплитуды смещений атомов цепочки сравнимы с $x_0(0)$ вплоть до значений $|n|$ порядка нескольких десятков.

Резюмируя результаты работы, следует сказать, что малые начальные поперечные смещения атомов и слабое трение существенно искажают временное развитие продольных колебаний атомов только для достаточно больших значений τ . Наименее чувствительны к начальным малым поперечным сдвигам продольные колебания того самого атома, который получил поперечное смещение. Для других атомов малые поперечные сдвиги не приводят к существенным изменениям наибольших смещений, соответствующих раскачке данного атома достигшей его упругой волной. Однако для больших τ на невозмущенные колебания этих атомов накладывается некоторый фон, относительная роль которого пропорциональна величине начального поперечного смещения. Наличие слабого трения приводит прежде всего к экспоненциальному уменьшению со временем значений смещений всех атомов цепочки сравнительно с бездиссипативным процессом. При этом экспоненциальный множитель один и тот же для всех атомов. Если для первично возбужденного атома потери энергии на трение за один цикл колебаний относительно невелики, то смещения, сравнимые с максимальными смещениями первично возбужденного атома, получают атомы внутри области, где n достигает значений не менее нескольких десятков. В тех случаях, когда трение нельзя считать слабым, область заметных смещений атомов невелика, а смещение первично возбужденного атома стремится к нулю в некотором медленном сугубо аperiodическом процессе.

Автор благодарит В. Г. Барьяхтара и Н. А. Хижняка за дискуссии, стимулировавшие выполнение данной работы.

Поступила 18 V 1970

ЛИТЕРАТУРА

1. Рыжов Ю. А., Стриженов Д. С. О взаимодействии атомов с поверхностью твердого тела. ПМТФ, 1967, № 4, стр. 113.
2. Z w a n z i g R. W. Collision of gas atom with cold surface. J. Chem. Phys., 1960, vol. 32, p. 1173.
3. М а ж у г а В. В. О столкновении атома с поверхностью твердого тела. ПМТФ, 1966, № 6 стр. 126.
4. Д о л г о в А. С., Х и ж н я к Н. А. О временном развитии колебаний в одномерной цепочке связанных гармонических осцилляторов. Прикл. механ., 1969, т. 5, вып. 11, стр. 107.
5. Ф р е н к е л ь Я. И. К теории явлений аккомодации и конденсации. Усп. физ. н., 1938, т. 20, вып. 1.
6. Д о л г о в А. С. Некоторые задачи динамики ограниченных кристаллических решеток при заданных начальных условиях. Физика твердого тела, 1969, т. 11, вып. 11, стр. 3104.