УДК 517.927.2, 531
MSC2010 34A25, 34A30, 70B99

© М. А. Гузев[1]

Закон Фурье для одномерного кристалла

Получено аналитическое представление для потока тепла одномерного гармонического кристалла для большого числа частиц. Показано, что поток тепла, идущий от одной частицы к другой, не связан с разностью температур между ними, т.е. классический закон Фурье не выполняется.

Ключевые слова: *закон Фурье, одномерный гармонический кристалл.*

В макроскопических системах при моделировании процессов теплопереноса используется закон Фурье, согласно которому поток тепла пропорционален градиенту температуры. Рассмотрение тепловых эффектов на микроскопических масштабах приводит к необходимости строить описание, не совпадающее с классическим законом Фурье. В частности, для одномерного гармонического кристалла на основе корреляционного анализа было получено соотношение связи теплового потока и температуры, демонстрирующее нарушение классического закона Фурье [1]. Для кристалла с большим числом частиц $n \gg 1$ представлено поведение температуры [1, 2], но поток тепла не исследовался. В данной работе этот пробел восполнен.

Напомним [1,2], что смещения частиц в модели одномерного гармонического кристалла определяются из уравнений

$$\ddot{u}_i = u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1},\ u_i|_{t\,=\,0} = 0,\ \dot{u}_i|_{t\,=\,0} = v_{i0}. \tag{1}$$

В момент времени t смещения и скорости как решение системы (1) даются формулами [2]

$$\begin{gathered} u_j = \sum_{j\,=\,1}^{n} \alpha_{jk} \frac{p_{k0}}{\omega_k} \sin \omega_k t,\ v_j = \sum_{k\,=\,1}^{n} \alpha_{jk} p_{k0} \cos \omega_k t, \\ \alpha_{jk} = \sqrt{\frac{2}{n+1}} \sin 2jz_k, \omega_k = 2 \sin z_k, z_k = \frac{\pi k}{2(n+1)}. \end{gathered} \tag{2}$$

Локальный поток тепла от j-частицы к $j+1$-частице (с точностью до коэффициента) равен $F_j = (v_{j+1} + v_j)(u_{j+1} - u_j)$ [3]. Распределение $P = P(\mathbf{p}_0)$ значений вектора $\mathbf{p}_0 = (p_{10}, ..., p_{n0})$ предполагается каноническим [4]:

$$P = C^{-1} \exp\left(-\frac{1}{2}\sum_{k\,=\,1}^{n} p_{k0}^2\right),\ C = \int\limits_{R^n} d\mathbf{p} \exp\left(-\frac{1}{2T_0}\sum_{k\,=\,1}^{n} p_{k0}^2\right) = (2T_0\pi)^{n/2},$$

[1] Институт прикладной математики ДВО РАН, 690041, г. Владивосток, ул. Радио, 7. Электронная почта: guzev@iam.dvo.ru

$$\int\limits_{R^n} p_{k_1 0} p_{k_2 0} P d\mathbf{p} = 2T_0 \delta_{k_1 k_2},$$

где T_0 имеет смысл средней температуры кристалла. Значение потока тепла в каждой точке среды получаем в результате усреднения локального потока тепла по значениям $p_{10}, ..., p_{n0}$:

$$\langle J_j \rangle_P = \langle (v_{j+1} + v_j)(u_{j+1} - u_j) \rangle_P, \tag{3}$$

где скобки $\langle\rangle_P$ обозначают усреднение по распределению $P = P(\mathbf{p}_0)$.

Подставим

$$u_{j+1} - u_j = \sqrt{\frac{2}{n+1}} \sum_{k=1}^{n} 2 \frac{p_{k0}}{\omega_j} \sin \omega_k t \sin z_k \cos[z_k(1+2j)],$$

$$v_{j+1} + v_j = \sqrt{\frac{2}{n+1}} \sum_{k=1}^{n} 2 p_{k0} \cos \omega_k t \cos z_k \sin[z_k(1+2j)],$$

в (3), тогда

$$\langle F_j \rangle_P = \frac{8}{n+1} T_0 \sum_{k=1}^{n} \sin z_k \cos z_k \cos[z_{k_1}(1+2j)] \sin[z_k(1+2j)] \frac{1}{\omega_k} \cos \omega_k t \sin \omega_k t. \tag{4}$$

Учитывая, что $\omega_k = 2 \sin z_k$ и $\sin 2\omega_k t = 2 \cos\omega_k t \sin\omega_k t$, получаем из (4)

$$\langle F_j \rangle_P = \frac{2T_0}{n+1} \sum_{k=1}^{n} \cos z_k \sin[2z_k(1+2j)] \sin[4 \sin z_k t]. \tag{5}$$

При $k \sim n$ члены ряда стремятся к нулю и основной вклад в (5) определяется первыми членами ряда. Поскольку $n \gg 1$, то при вычислении суммы перейдем к интегрированию, полагая $\Delta k \to dz \frac{2(n+1)}{\pi}$, тогда (5) можно записать в виде

$$\langle F_j \rangle_P \approx T_0 \frac{4}{\pi} \int\limits_0^{\pi/2} dz \cos z \sin[2z(1+2j)] \cos(4t \sin z). \tag{6}$$

Учитывая тождество

$$\cos z \sin[2z(1+2j)] = \frac{1}{2} [\sin z(1+4j) + \sin z(3+4j)],$$

получаем

$$\begin{aligned} \frac{4}{\pi} \int\limits_0^{\pi/2} dz \cos z \sin[z(1+2j)] \sin(4t \sin z) = \frac{2}{\pi} \int\limits_0^{\pi/2} dz \sin[z(4j+1)] \sin(4t \sin z) + \\ + \frac{2}{\pi} \int\limits_0^{\pi/2} d\theta \sin[z(4j+3)] \sin(4t \sin z) = J_{4j+1}(4t) + J_{4j+3}(4t), \end{aligned} \tag{7}$$

где $J_n(z)$ — функция Бесселя. Отсюда и из (6) следует, что тепловой поток пропорционален комбинации функций Бесселя:

$$\langle F_j \rangle_P \sim J_{4j+1}(4t) + J_{4j+3}(4t). \tag{8}$$

Теперь проверим выполнимость классического закона Фурье. Напомним, что в длинноволновом приближении для большого числа $n >> 1$ частиц было получено следующее представление для температуры частицы [5]:

$$T_j = \frac{T_0}{2}\left[1 + J_0(4t) + ...\right]. \tag{9}$$

Эта формула дает ведущий вклад в асимптотическую формулу для температуры, а многоточия указывают на члены более высокого порядка малости. Из (9) следует, что разность температуры между частицами мала, тогда, учитывая (8), получаем, что $\langle F_j \rangle_P$ не пропорционален $T_{j+1} - T_j$. Таким образом, классический закон Фурье не выполняется.

Покажем, что переход к интегралу (6) дает ошибку порядка $1/n$. Поскольку справедливо неравенство $0 < z_k = \frac{\pi k}{2(n+1)} < \frac{\pi}{2}$, то (5) допускает следующую редукцию:

$$\begin{aligned}\langle F_j \rangle_P &= \frac{2T_0}{n+1}\int\limits_0^{\pi/2} d\theta \sum_{k\,=\,1}^{n} \delta(\theta - z_k)\cos\theta\sin[2\theta(1+2j)]\sin[4\sin(\theta t)] = \\ &= \frac{2T_0}{n+1}\int\limits_0^{\pi/2} d\theta \sum_{k\,=\,-\infty}^{\infty} \delta(\theta - z_k)\cos\theta\sin[2\theta(1+2j)]\sin[4\sin(\theta t)].\end{aligned} \tag{10}$$

Разложим дельта-функцию в ряд Фурье:

$$\sum_{k\,=\,-\infty}^{+\infty} \delta(\theta - z_k) = \Pi + 2\Pi \sum_{N\,=\,1}^{+\infty} \cos(2\pi\Pi N\theta),$$

где величина $\Pi = \frac{2(n+1)}{\pi}$. Тогда (10) записывается в виде

$$\begin{aligned}\langle F_j \rangle_P &= \frac{2T_0}{\pi}\int\limits_0^{\pi/2} d\theta\cos\theta\sin[\theta(1+2j)]\sin[4\sin(\theta t)] + \\ &+ \frac{4T_0}{\pi}\int\limits_0^{\pi/2} d\theta\cos\theta\sin[\theta(1+2j)]\sin[4\sin(\theta t)]\sum_{N\,=\,1}^{+\infty}\cos(2\pi N\theta\Pi).\end{aligned} \tag{11}$$

Учитывая тождество (7), получаем

$$\frac{2}{\pi}\int\limits_0^{\pi/2} d\theta\cos\theta\sin[\theta(1+2j)]\sin[4\sin(\theta t)] = \frac{1}{2}[J_{4j+1}(4t) + J_{4j+3}(4t)]. \tag{12}$$

Интегрирование по частям во втором интеграле (11) дает

$$\begin{gathered}\int\limits_0^{\pi/2} d\theta \cos\theta \sin[2\theta(1+2j)] \sin[4\sin(\theta t)] \sum_{N=1}^{+\infty} \cos(2\pi N\theta\Pi) = \\ = -\int\limits_0^{\pi/2} d\theta \frac{d}{d\theta} \left[\sin\left(4t\sin\theta\right)\sin[2\theta(2j+1)]\cos\theta\right] \sum_{N=1}^{+\infty} \frac{\sin(2\pi N\Pi\theta)}{2\pi N\Pi}.\end{gathered} \tag{13}$$

Для вычисления суммы ряда воспользуемся соотношением [6]:

$$S(\theta) = \sum_{N=1}^{\infty} \frac{\sin(2\pi\Pi N\theta)}{N} = \sum_{N=1}^{\infty} \frac{\sin[4(n+1)N\theta]}{N} = \frac{4(n+1)\theta-\pi}{2},\ 0<\theta<\frac{\pi}{2(n+1)}.$$

Обозначим через $PS(\theta)$ периодическое продолжение функции $S(\theta)$ с $(0,\frac{\pi}{2(n+1)})$ на $(0,\pi/2)$ и запишем (13) в виде

$$\begin{gathered}\int\limits_0^{\pi/2} d\theta \frac{d}{d\theta} \left[\sin\left(4t\sin\theta\right)\sin[2\theta(2j+1)]\cos\theta\right] \sum_{N=1}^{+\infty} \frac{\sin[4(n+1)N\theta]}{4(n+1)N} = \\ = \frac{1}{4(n+1)} \int\limits_0^{\pi/2} d\theta \frac{d}{d\theta} \left[\cos\left(4t\sin\theta\right)\sin[2\theta(2j+1)]\cos\theta\right] PS(\theta).\end{gathered}$$

Подставляя это выражение в (13) и (11), получаем

$$\langle F_j\rangle_P = T_0 \left[J_{4j+1}(4t) + J_{4j+3}(4t)\right] + \psi(t), \tag{14}$$

где

$$\psi(t) = -\frac{T_0}{\pi(n+1)} \int\limits_0^{\pi/2} d\theta D(\theta) PS(\theta), \tag{15}$$

$$\begin{gathered}D(\theta) = 4t\cos\left(4t\sin\theta\right)\sin[2\theta(2j+1)](\cos\theta)^2 + \\ +2(2j+1)\sin\left(4t\sin\theta\right)\cos[2\theta(2j+1)]\cos\theta - \sin\left(4t\sin\theta\right)\sin[2\theta(2j+1)]\sin\theta.\end{gathered}$$

Из (15) видно, что для фиксированного момента времени функция $\psi(t) \sim \underline{O}\left(\frac{1}{n}\right)$.

С точки зрения физики представляется интересным рассмотреть случай $t \gg 1$, что соответствует временам, превышающим время колебания частицы в ячейке и $D(\theta) \sim t$. Выражение (15) вычислим методом стационарной фазы. В интеграле функция $\sin\theta$, которая является аргументом для $\cos(4t\sin\theta)$, имеет на отрезке $[0,\pi/2]$ единственную стационарную точку $\theta_* = \pi/2$, так что $\sin\pi/2 = 1$. Но функция $D(\theta)$ при $\theta = \pi/2$ равна нулю, поэтому для нахождения асимптотики интеграла следует учесть более высокие по переменной $\pi/2-\theta$ члены разложения $D(\theta)$. Размер окрестности точки, дающей основной вклад в интеграл, имеет порядок $1/\sqrt{t}$, тогда в этой окрестности справедливы следующие оценки:

$$\sin[2\theta(2j+1)](\cos\theta)^2 \sim \underline{O}\left(\frac{1}{t^{3/2}}\right),\ \cos\theta \sim \underline{O}\left(\frac{1}{\sqrt{t}}\right),\ \sin[2\theta(2j+1)] \sim \underline{O}\left(\frac{1}{\sqrt{t}}\right).$$

Тогда в окрестности критической точки значение $D(\theta) \sim \underline{O}\big(1/\sqrt{t}\big)$. Дополнительная малость $\underline{O}\big(1/\sqrt{t}\big)$ в (15) появляется при применении метода стационарной фазы, тогда

$$\psi(t) \sim \underline{O}\left(\frac{1}{nt}\right).$$

Поскольку $J_{4j+1}(4t)+J_{4j+3}(4t) \sim \underline{O}\big(1/t^{3/2}\big)$ при $t \gg 1$, то значение $\psi(t)$ мало по сравнению с функциями Бесселя при условии $\sqrt{t} \ll n$. В безразмерных переменных время прохождения возмущения по кристаллу $\tau \sim n$, тогда $\sqrt{\tau} \sim \sqrt{n} \ll n$. Однако можно выбрать положительный параметр $\varepsilon < 1/2$, так что

$$\sqrt{\tau} \ll n^{1/2+\varepsilon} \ll \sqrt{t} \ll n.$$

Это неравенство соответствует временам t, для которых возмущение по кристаллу может проходить многократно.

Список литературы

[1] А. М. Кривцов, “Распространение тепла в бесконечном одномерном гармоническом кристалле”, *Доклады Академии наук*, **464**:2, (2015), 162–166.

[2] М. А. Гузев, А. А. Дмитриев, “Осцилляционно-затухающее поведение температуры в кристалле”, *Дальневост. матем. журн.*, **17**:2, (2017), 170–179.

[3] S. Lepri, R. Livi, A. Politi, “Thermal conduction in classical low-dimensional lattices”, *Physics Reports*, **377**, (2003), 1–80.

[4] Дж. В. Гиббс, *Термодинамика. Статистическая механика*, Наука, Москва, 1982.

[5] А. М. Кривцов, “Колебания энергий в одномерном кристалле”, *Доклады Академии наук*, **458**:3, (2014), 279–281.

[6] А. П. Прудников, Ю. А. Брычков, О. И. Маричев, *Интегралы и ряды. Элементарные функции*, в 3 т., т. 1, Физматлит, Москва, 2002.

Поступила в редакцию
13 апреля 2018 г.

Работа поддержана РНФ (грант № 14-11-00079).

Guzev M. A. The Fourier law for a one-dimensional crystal. *Far Eastern Mathematical Journal.* 2018. V. 18. No 1. P. 34–38.

ABSTRACT

For a large number of particles, an analytic representation is obtained for the heat flux of a one-dimensional harmonic crystal. It is shown that the heat flux from one particle to an another one is not linked with the temperature difference between them, i.e. the classical Fourier law is not satisfied.

Key words: *Fourier law, one-dimensional harmonic crystal.*