

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

© М. А. Гузев¹

Точная формула для температуры одномерного кристалла

Получено аналитическое представление для температуры в одномерном гармоническом кристалле. Показано, что для большого числа частиц ведущий вклад в температурное распределение не зависит от номера частицы.

Ключевые слова: *одномерный гармонический кристалл, молекулярная динамика, температура.*

Введение

Хорошо известны результаты численного моделирования высокочастотных колебаний кинетической и потенциальной энергий частицы в идеальной кристаллической решетке [1]: если в начальный момент времени частицы упорядочены в идеальной кристаллической решетке и их скорости заданы случайно, то процесс перехода одного типа энергии в другой сопровождается высокочастотным колебательным процессом с затухающей амплитудой. Подход к теоретическому анализу этого явления был предложен в [2] для модели одномерного гармонического кристалла, который рассматривался как цепочка частиц, имеющих равную массу m и соединенных одинаковыми линейными пружинами с жесткостью k . Предполагается, что взаимодействие между частицами определяется ближайшими соседями

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

где функция u_i определяет смещение частицы из положения равновесия (время измеряется в единицах $\sqrt{m/k}$). Развитый в [2] метод аналитического описания колебаний предполагает, что число частиц $n \gg 1$. При этом условии был также предложен приближенный способ вычисления кинетической энергии, основанный на континуальном приближении [3]. В данной работе снимем ограничение $n \gg 1$ и изложим основные идеи и результат, говорящий о поведении во времени температуры частиц для модели одномерного гармонического кристалла.

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

1. Основные соотношения модели

Локальной мерой температуры частицы является ее кинетическая энергия $K_j = v_j^2/2$, где введена скорость частицы $v_j = \dot{u}_j$. В момент времени t набор координат и скоростей определяется как решение системы (1) и дается формулами

$$\begin{aligned} u_j &= \sum_{k=1}^n \alpha_{jk} \varphi_k(t), & v_j &= \sum_{k=1}^n \alpha_{jk} \dot{\varphi}_k(t), \\ \alpha_{jk} &= \sqrt{\frac{2}{n+1}} \sin 2jz_k, & z_k &= \frac{\pi k}{2(n+1)}, \end{aligned} \quad (2)$$

в которых функция $\varphi_k(t)$ удовлетворяет уравнению

$$\ddot{\varphi}_k(t) = -\omega_k^2 \varphi_k(t), \quad \omega_k = 2 \sin z_k, \quad \varphi_k|_{t=0} = 0, \quad \dot{\varphi}_k|_{t=0} = p_{k0}. \quad (3)$$

Соотношения (2), (3) реализуют общую идею построения решения системы уравнений (1) в базисе, образованном собственными векторами матрицы разностного оператора этой системы (см., например, [3]).

Распределение $P = P(\mathbf{p}_0)$ значений вектора $\mathbf{p}_0 = (p_{10}, \dots, p_{n0})$ предполагается каноническим [4]:

$$\begin{aligned} P &= C^{-1} \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{k=1}^n p_{k0}^2\right), & C &= \int_{R^n} d\mathbf{p} \exp\left(-\frac{1}{2T_0} \sum_{k=1}^n p_{k0}^2\right) = (2T_0\pi)^{n/2}, \\ & & \int_{R^n} p_{k_1 0} p_{k_2 0} P d\mathbf{p} &= 2T_0 \delta_{k_1 k_2}, \end{aligned}$$

где T_0 имеет смысл средней температуры кристалла. Значение температуры в каждой точке среды получим в результате усреднения локальной кинетической энергии K_j по значениям вектора $\mathbf{p}_0 = (p_{10}, \dots, p_{n0})$:

$$\langle K_j \rangle_P = \left\langle \frac{v_j^2}{2} \right\rangle_P, \quad (4)$$

где скобки $\langle \rangle_P$ обозначают усреднение по распределению $P = P(\mathbf{p}_0)$. Из (1)–(3) следует, что

$$v_j = \sum_{k=1}^n \alpha_{jk} p_{k0} \cos \omega_k t, \quad p_{j0} = \sum_{k=1}^n \alpha_{jk} v_{k0}.$$

Подставляя это представление в (4), получаем

$$\begin{aligned} \langle K_j \rangle_P &= \frac{2T_0}{n+1} \sum_{k=1}^n (\sin 2jz_k)^2 (\cos \omega_k t)^2 = \\ &= \frac{T_0}{2(n+1)} \sum_{k=1}^n \left(1 - \cos \frac{2\pi jk}{n+1} + \cos 2\omega_k t - \cos \frac{2\pi jk}{n+1} \cos 2\omega_k t\right). \end{aligned} \quad (5)$$

2. Суммирование

Приближенная формула в [3] была получена благодаря условию $n \gg 1$, которое позволило перейти к интегралу в (5). Чтобы уточнить ее, учтем представление, полученное Якоби [5], и формулу суммирования для тригонометрических функций [6]:

$$\cos(2\omega_k t) = \cos(4t \sin z_k) = J_0(4t) + 2 \sum_{p=1}^{\infty} J_{2p}(4t) \cos(2pz_k),$$

$$\sum_{k=1}^n \cos \frac{\pi pk}{n+1} = \begin{cases} 0, & \text{если } p \text{ нечетное,} \\ -1, & \text{если } p \text{ четное.} \end{cases}$$

Тогда

$$\sum_{k=1}^n \left(-\cos \frac{2\pi jk}{n+1} + \cos 2\omega_k t \right) = 1 + nJ_0(4t) - 2 \sum_{p=1}^{\infty} J_{4p}(4t).$$

Сумма бесселевых функций определяется соотношением [7]:

$$\sum_{p=1}^{\infty} J_{4p}(4t) = \frac{1}{2} [\cos^2 2t - J_0(4t)].$$

Выполненные вычисления приводят к следующему результату для первых трех сумм в правой части (5):

$$\sum_{k=1}^n \left(1 - \cos \frac{2\pi jk}{n+1} + \cos 2\omega_k t \right) = n + \sin^2 2t + (n+1)J_0(4t). \quad (6)$$

Сумма, порождаемая последним вкладом в (5), равна

$$\sum_{k=1}^n \cos \frac{2\pi jk}{n+1} \cos 2\omega_k t = -J_0(4t) + 2 \sum_{p=1}^{\infty} CC \cdot J_{2p}(4t), \quad (7)$$

$$CC = \sum_{k=1}^n \cos \frac{2\pi jk}{n+1} \cos \frac{\pi pk}{n+1} = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^n \left[\cos \frac{\pi k}{n+1} (p-2j) + \cos \frac{\pi k}{n+1} (p+2j) \right].$$

Если применить формулу для суммы тригонометрического ряда, то

$$CC = \frac{1}{2} \frac{\cos \frac{\pi(p-2j)}{2} \sin n \frac{\pi(p-2j)}{2(n+1)}}{\sin \frac{\pi(p-2j)}{2(n+1)}} + \frac{1}{2} \frac{\cos \frac{\pi(p+2j)}{2} \sin n \frac{\pi(p+2j)}{2(n+1)}}{\sin \frac{\pi(p+2j)}{2(n+1)}}. \quad (8)$$

Отсюда видно, что при некотором соотношении между p и j значение знаменателя является малым, однако компенсируется малостью числителя, что приводит к необходимости раскрыть неопределенность полученного выражения. Поэтому раскроем числа p в (7) по четырем непересекающимся множествам: (A), (B), (C), (D) – и запишем

$$\sum_{p=1}^{\infty} CC \cdot J_{2p}(4t) = \sum_{p \in (A)} CC \cdot J_{2p}(4t) + \sum_{p \in (B)} CC \cdot J_{2p}(4t) +$$

$$+ \sum_{p \in (C)} CC \cdot J_{2p}(4t) + \sum_{p \in (D)} CC \cdot J_{2p}(4t). \quad (9)$$

Первое множество (A) определим из условия, согласно которому $p-2j, p+2j$ не делятся на $n+1$, тогда CC вычисляется с использованием (8) и

$$\sum_{p \in (A)}^{\infty} CC \cdot J_{2p}(4t) = - \sum_{N=1}^{\infty} J_{4N}(4t) = -\frac{1}{2}[\cos^2 2t - J_0(4t)]. \quad (10)$$

Второе множество (B) включает такие p , для которых $p-2j$ делится на $n+1$, а $p+2j$ не делится на $n+1$. В этом случае p параметризуется соотношением $p=2j+m(n+1)$, где m — натуральное число, и $p+2j=4j+m(n+1)$ не делится на $n+1$, если $j \neq (n+1)/4$. Тогда

$$CC = \sum_{k=1}^n \cos \frac{2\pi jk}{n+1} \cos \frac{\pi k}{n+1} [2j + m(n+1)] = \sum_{k=1}^n (-1)^{km} \left(\cos \frac{2\pi jk}{n+1} \right)^2. \quad (11)$$

Если m — четное, то

$$CC = \sum_{k=1}^n \left(\cos \frac{2\pi jk}{n+1} \right)^2 = \frac{n}{2} + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^n \cos \frac{4\pi jk}{n+1} = \begin{cases} \frac{n-1}{2}, & j \neq \frac{n+1}{2}; \\ n, & j = \frac{n+1}{2}. \end{cases}$$

Для нечетного m из (11) получаем

$$\begin{aligned} CC &= \sum_{k=1}^n (-1)^k \left(\cos \frac{2\pi jk}{n+1} \right)^2 = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{k=1}^n (-1)^k \left[1 + \cos \frac{4\pi jk}{n+1} \right] = \begin{cases} \frac{(-1)^n - 1}{2}, & j \neq \frac{n+1}{4}; \\ \frac{n+(-1)^{n-1}}{2}, & j = \frac{n+1}{4}. \end{cases} \end{aligned}$$

Проведенные вычисления позволяют записать следующий результат для множества (B):

$$\begin{aligned} &\sum_{p \in (B)}^{\infty} CC \cdot J_{2p}(4t) = \\ &\left(1 - \delta_{j, \frac{n+1}{4}} \right) \left(\sum_{\substack{p=2j+m(n+1), \\ \text{четные } m}}^{\infty} CC \cdot J_{2p}(4t) + \sum_{\substack{p=2j+m(n+1), \\ \text{нечетные } m}}^{\infty} CC \cdot J_{2p}(4t) \right) = \\ &= \left(1 - \delta_{j, \frac{n+1}{4}} \right) n \delta_{j, \lfloor \frac{n+1}{2} \rfloor} \delta_{\frac{n+1}{2}, \lfloor \frac{n+1}{2} \rfloor} \sum_{\text{четные } m}^{\infty} J_{2(1+m)(n+1)}(4t) + \\ &+ \frac{n-1}{2} \left(1 - \delta_{j, \frac{n+1}{4}} \right) \left(1 - \delta_{j, \frac{n+1}{2}} \right) \sum_{\text{четные } m}^{\infty} J_{2(2j+m(n+1))}(4t) + \\ &+ \frac{(-1)^n - 1}{2} \left(1 - \delta_{j, \frac{n+1}{4}} \right) \sum_{\text{нечетные } m}^{\infty} J_{2(2j+m(n+1))}(4t). \quad (12) \end{aligned}$$

Третье множество (C) задается условием: $p + 2j$ делится на $n + 1$, а $p - 2j$ не делится на $n + 1$. Мы параметризуем p соотношением $p = -2j + q(n + 1)$ с натуральным q , тогда соответствующая множеству (C) в (9) сумма вычисляется способом, аналогичным для множества (B) , и равна

$$\begin{aligned} & \sum_{p \in (C)} CC \cdot J_{2p}(4t) = \\ & = \left(1 - \delta_{j, \frac{n+1}{4}}\right) n \delta_{j, \left[\frac{n+1}{2}\right]} \delta_{\frac{n+1}{2}, \left[\frac{n+1}{2}\right]} \sum_{\text{четные } m}^{\infty} J_{2(1+m)(n+1)}(4t) + \\ & + \frac{n-1}{2} \left(1 - \delta_{j, \frac{n+1}{4}}\right) \left(1 - \delta_{j, \frac{n+1}{2}}\right) \sum_{\text{четные } m}^{\infty} J_{2(-2j+m(n+1))}(4t) + \\ & + \frac{(-1)^n - 1}{2} \left(1 - \delta_{j, \frac{n+1}{4}}\right) \sum_{\text{нечетные } m}^{\infty} J_{2(-2j+m(n+1))}(4t). \end{aligned} \quad (13)$$

Четвертое множество (D) определяется из требования, по которому числа $p - 2j$ и $p + 2j$ делятся на $n + 1$. Тогда значения p можно параметризовать: $p = 2j + r(n + 1)$, $p = -2j + s(n + 1)$ с натуральными r, s . Отсюда следует, что

$$p = \frac{r+s}{2}(n+1), \quad j = \frac{s-r}{4}(n+1). \quad (14)$$

Поскольку $1 \leq j \leq n$, то из последнего соотношения (14) следуют ограничения на r, s :

$$\alpha) s - r = 1, \quad \beta) s - r = 2, \quad \gamma) s - r = 3. \quad (15)$$

При выполнении условия α) получаем из (14) величины $p = r(n + 1) + (n + 1)/2$ и $j = (n + 1)/4$, т.е. видим, что решение для j существует только для $n + 1$, которое делится на 4. Значение CC (7) равно

$$CC = \sum_{k=1}^n \cos \frac{\pi k}{2} \cos \frac{\pi k}{n+1} [r(n+1) + (n+1)/2] = \sum_{k=1}^n (-1)^{kr} [\cos(\pi k/2)]^2. \quad (16)$$

Для четного r сумма находится на основе соотношения

$$\sum_{k=1}^n [\cos(\pi k/2)]^2 = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^n (1 + \cos \pi k) = \frac{n}{2} + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^n (-1)^k = \frac{n}{2} + \frac{(-1)^n - 1}{4}.$$

При нечетном r получаем

$$\sum_{k=1}^n (-1)^k [\cos(\pi k/2)]^2 = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^n (-1)^k + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^n (-1)^k \cos k\pi = \frac{(-1)^n - 1}{4} + \frac{n}{2}.$$

Таким образом,

$$CC = \frac{n}{2} + \frac{(-1)^n - 1}{4}. \quad (17)$$

Для условия β) (15) находим $p = (r+1)(n+1)$, $j = (n+1)/2$ и

$$\cos \frac{\pi rk}{n+1} = \cos \pi k(r+1) = (-1)^{k(r+1)}, \quad \cos \frac{2\pi jk}{n+1} = \cos \pi k = (-1)^k.$$

Тогда $CC = \sum_{k=1}^n (-1)^{kr}$ и

$$CC = \begin{cases} n, & \text{для четных } r, \\ \frac{(-1)^n - 1}{2}, & \text{для нечетных } r. \end{cases} \quad (18)$$

Для последнего условия γ) в (15) получаем $p = (r+3/2)(n+1)$ и $j = 3(n+1)/4$. Поскольку

$$\cos \frac{\pi rk}{n+1} = \cos[\pi k(r+1) + \pi k/2] = (-1)^{k(r+1)} \cos[\pi k/2], \quad \cos \frac{2\pi jk}{n+1} = \cos[\pi k/2],$$

то отсюда и из (7) следует

$$CC = \sum_{k=1}^n (-1)^{k(r+1)} [\cos(\pi k/2)]^2,$$

совпадающее с (16), результат для которого дается соотношением (17).

Следовательно, на основе (16)–(18) можно сформулировать окончательный результат для множества (D) :

$$\begin{aligned} \sum_{p \in (D)} CC \cdot J_{2p}(4t) &= \left(\frac{n}{2} + \frac{(-1)^n - 1}{4} \right) \delta_{j, [\frac{n+1}{4}]} \delta_{\frac{n+1}{4}, [\frac{n+1}{4}]} \sum_{r=1}^{\infty} J_{(1+2r)(n+1)}(4t) + \\ &+ \delta_{j, [\frac{n+1}{2}]} \delta_{\frac{n+1}{2}, [\frac{n+1}{2}]} \left[n \sum_{\text{четные } r}^{\infty} J_{2(1+r)(n+1)}(4t) + \frac{(-1)^n - 1}{2} \sum_{\text{нечетные } r}^{\infty} J_{2(1+r)(n+1)}(4t) \right] + \\ &+ \delta_{j, [\frac{3(n+1)}{4}]} \delta_{\frac{n+1}{4}, [\frac{n+1}{4}]} \left(\frac{n}{2} + \frac{(-1)^n - 1}{4} \right) \sum_{r=1}^{\infty} J_{2(r+3(n+1)/2)}(4t). \end{aligned} \quad (19)$$

3. Представление для температуры

Суммируя результаты вычислений предыдущего раздела, запишем формулу для распределения температуры в кристалле при произвольном числе частиц n :

$$\langle K_j \rangle_P = \frac{T_0}{2} \left(1 + J_0(4t) + \frac{\Phi_j}{n+1} \right). \quad (20)$$

В (20) функция Φ_j определяется соотношением

$$\Phi_j = -2 \sum_{p \in (B)} CC \cdot J_{2p}(4t) - 2 \sum_{p \in (C)} CC \cdot J_{2p}(4t) - 2 \sum_{p \in (D)} CC \cdot J_{2p}(4t), \quad (21)$$

где отдельные слагаемые даются формулами (12), (13), (19). Чтобы проанализировать структуру Φ_j , исключим из рассмотрения точки, в которых j может принимать значения $\frac{n+1}{4}$, $\frac{n+1}{2}$, $\frac{3(n+1)}{4}$, и дополнительно предположим, что $n \gg 1$. Тогда при асимптотическом разложении (21) по $1/n$ ведущее слагаемое равно

$$\Phi_j = \sum_{\text{четные } m}^{\infty} [J_{2(2j+m(n+1))}(4t) + J_{2(-2j+q(n+1))}(4t) + \dots], \quad (22)$$

где многоточия указывают на члены порядка малости $1/n$ и выше. При вычислении сумм в (22) воспользуемся интегральным представлением для функции Бесселя:

$$J_{2p}(t) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} d\theta \cos(t \sin \theta) \cos(2p\theta).$$

Это позволяет переписать (22) в виде

$$\Phi_j = \frac{2}{\pi} \sum_{N=1}^{\infty} \int_0^{\pi} d\theta \cos(4t \sin \theta) \cos(4j\theta) \cos[4N(n+1)\theta].$$

Интегрируя по частям, получаем

$$\begin{aligned} & \sum_{N=1}^{\infty} \int_0^{\pi} d\theta \cos(4t \sin \theta) \cos(4j\theta) \cos[4N(n+1)\theta] = \\ & = - \sum_{N=1}^{\infty} \int_0^{\pi} d\theta \frac{d}{d\theta} [\cos(4t \sin \theta) \cos(4j\theta)] \frac{\sin[4N(n+1)\theta]}{4N(n+1)}. \end{aligned}$$

Для вычисления суммы ряда можно воспользоваться справочной формулой [6]

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

$$0 < \theta < \frac{\pi}{2(n+1)}.$$

Обозначим через $PS(\theta)$ периодическое продолжение функции $S(\theta)$ с $(0, \frac{\pi}{2(n+1)})$ на $(0, \pi)$, тогда Φ_j равно

$$\Phi_j = - \frac{1}{2\pi(n+1)} \int_0^{\pi} d\theta D(\theta) PS(\theta). \quad (23)$$

$$\begin{aligned} D(\theta) &= \frac{d[\cos(4t \sin \theta) \cos(4j\theta)]}{d\theta} = \\ &= 4t \sin(4t \sin \theta) \cos(4j\theta) \cos(\theta) - 4j \cos(4t \sin \theta) \sin(4j\theta). \end{aligned}$$

Отсюда видно, что для фиксированного момента времени функция $\Phi_j \sim \underline{O}(\frac{1}{n})$.

Поскольку $D(\theta) \sim t, j$, то представляется интересным исследовать поведение Φ_j при $t \gg 1$ и $j \sim n$. Интеграл (23) является интегралом типа Фурье [8]. Для $t \gg 1$ он вычисляется с помощью метода стационарной фазы. На отрезке $[0, \pi]$ существует единственная стационарная точка $\theta_* = \pi/2$, в которой $D(\theta_*) = 0$. Поэтому для нахождения асимптотики интеграла следует учесть более высокие по переменной $\pi/2 - \theta$ члены разложения $D(\theta)$. Размер окрестности, дающей основной вклад в интеграл, имеет порядок $1/\sqrt{t}$. Тогда в этой окрестности справедливы следующие оценки:

$$\cos\left(\frac{\pi}{2} - \theta\right) \sim \underline{O}\left(\frac{1}{\sqrt{t}}\right), \quad \sin(4j\theta) = \sin 4j\left(\frac{\pi}{2} - \theta\right) \sim \underline{O}\left(\frac{j}{\sqrt{t}}\right)$$

и, как следствие, $D(\theta) \sim \underline{O}(\sqrt{t}j)$. При применении метода стационарной фазы в интеграле (23) возникает коэффициент $1/\sqrt{t}$ в качестве множителя, тогда $\Phi_j \sim \underline{O}\left(\frac{j}{n}\right) \sim \overline{O}(1)$ для конечных значений j . При $j \sim n \gg 1$ следует уточнить оценку для Φ_j , поскольку можно применить лемму Римана – Лебега [8]. В этом случае для фиксированного момента времени $\Phi_j \sim \frac{j}{n}\overline{O}(1) \sim \overline{O}(1)$. Значит, при $t \gg 1, j \sim n$ функция $\Phi_j \sim \overline{O}(1)$.

Таким образом, для большого числа частиц $n \gg 1$ асимптотическое поведение температуры частицы дается формулой

$$\langle K_j \rangle_P = \frac{T_0}{2} [1 + J_0(4t) + \overline{O}(1)].$$

Она совпадает с результатом, полученным в [2,3] для средней кинетической энергии.

Список литературы

- [1] М. Р. Аллен, А. К. Тилдсли, *Computer Simulation of Liquids*, Clarendon Press, Oxford, 1987.
- [2] А. М. Кривцов, “Колебания энергий в одномерном кристалле”, *Доклады Академии наук*, **458**:3, (2014), 279–281.
- [3] М. А. Гузев, А. А. Дмитриев, “Осцилляционно-затухающее поведение температуры в кристалле”, *Дальневост. матем. журн.*, **17**:2, (2017), 170–179.
- [4] Дж. В. Гиббс, *Термодинамика. Статистическая механика*, Наука, Москва, 1982.
- [5] Г. Н. Ватсон, *Теория беселевых функций. Часть первая*, Издательство иностранной литературы, Москва, 1949.
- [6] А. П. Прудников, Ю. А. Брычков, О. И. Маричев, *Интегралы и ряды. Элементарные функции*, в 3 т., т. 1, Физматлит, Москва, 2002.
- [7] А. П. Прудников, Ю. А. Брычков, О. И. Маричев, *Интегралы и ряды. Специальные функции*, в 3 т., т. 2, Физматлит, Москва, 2003.
- [8] М. В. Федорюк, *Асимптотика: интегралы и ряды (СМБ)*, Наука ГРФМЛ, Москва, 1987.

Поступила в редакцию
13 апреля 2018 г.

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

Guzev M. A. The exact formula for the temperature of a one-dimensional crystal. *Far Eastern Mathematical Journal*. 2018. V. 18. No 1. P. 39–47.

ABSTRACT

An analytical representation is obtained for the temperature in a one-dimensional harmonic crystal. It is shown that for a large number of particles, the leading contribution to the temperature distribution does not depend on the particle number.

Key words: *one-dimensional harmonic crystal, molecular dynamics, temperature.*