Дальневосточный математический журнал. 2020. Т. 20. № 1. С. 52–57

УДК 517.927,531,534.1
MSC2010 34A30,34B05,80A20

© А. И. Гудименко[1]

Тепловой поток в гармонической решетке при одном неканоническом распределении ее начальных состояний

Решается задача о тепловом потоке в одномерной полубесконечной цепи гармонически связанных осцилляторов при максвелловском распределении начальных скоростей и нулевых начальных смещениях частиц цепи. Такое распределение, как полагают, достигается при импульсном нагревании образца. Получены точные формулы для корреляционных функций состояний цепи, ее локальной температуры и локального теплового тока.

Ключевые слова: *гармоническая цепь, тепловой поток, переменные Шредингера.*

Введение

Задача о движении тепла в одномерной цепи гармонически связанных осцилляторов (далее — гармонической цепи) при максвелловском распределении начальных скоростей и нулевых начальных смещениях частиц цепи рассматривалась в работах [1, 2]. Были вычислены корреляционные функции состояний конечной цепи и асимптотики локальной температуры и локального теплового тока при стремлении длины цепи к бесконечности.

В настоящей заметке эта задача решается для полубесконечной цепи. Локальная температура и локальный тепловой ток вычисляются непосредственно, минуя рассмотрение конечной цепи. Такой подход значительно сокращает вывод результирующих формул. Исследуются случаи цепи с закрепленным и со свободным концом. В первом случае полученные выражения для температуры и теплового тока совпадают с приведенными в указанных работах (см. также [3]), второй случай в этих работах не рассматривался.

Еще одна особенность предлагаемого подхода к решению задачи состоит в использовании координат Шредингера [4], которые, как мы полагаем, также упрощают вычисления при работе с бесконечной гармонической цепью.

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

1. Динамическая система

Рассмотрим сначала случай полубесконечной гармонической цепи с закрепленным концом. Свободные колебания такой цепи в переменных Шредингера (см. Приложение) описываются начально-граничной задачей

$$\frac{dx_l}{d\tau} = \frac{1}{2}(x_{l+1} - x_{l-1}), \quad l \geqslant 1, \quad t \geqslant 0; \tag{1}$$

$$x_l(0) = x_l^0, \quad l \geqslant 1; \tag{2}$$

$$x_0 = 0. \tag{3}$$

Введем также начальную задачу

$$\frac{dx_l}{d\tau} = \frac{1}{2}(x_{l+1} - x_{l-1}), \quad l \in \mathbb{Z}, \tag{4}$$

$$x_l(0) = x_l^0, \quad l \in \mathbb{Z}. \tag{5}$$

Она описывает свободные колебания бесконечной гармонической цепи и имеет известное решение [4]

$$x_l = \sum_{l' \in \mathbb{Z}} x_{l'}^0 J_{l'-l}(\tau). \tag{6}$$

Теорема 1. *Задача* (1)–(3) *эквивалентна задаче* (4), (5), *если в качестве начальных условий* (5) *взять условия* (2), *продолженные на интервал* $l \leqslant 0$ *посредством соотношения*

$$x_{-l} = (-1)^{l+1} x_l. \tag{7}$$

Задача (1)–(3) *имеет решение*

$$x_l = \sum_{l' \geqslant 1} x_{l'}^0 \left[J_{l'-l}(\tau) - (-1)^l J_{l'+l}(\tau)\right]. \tag{8}$$

Доказательство. Пусть (x_l), $l \geqslant 0$, — произвольное решение задачи (1)–(3). Продолжим его посредством (7) на все $l \in \mathbb{Z}$. Непосредственно проверяется, что это продолжение удовлетворяет системе уравнений (4). Обратно, пусть (x_l), $l \in \mathbb{Z}$, — решение системы (4) с начальными условиями (2), продолженными на $l \leqslant 0$ посредством (7). Проверка показывает, что любое решение системы (4) сохраняет (7). Так как (7) содержит граничное условие (3), то мы заключаем, что (x_l), $l \geqslant 0$, — решение задачи (1)–(3).

Отметим, что соотношение (7) следует из требования, чтобы решение (6) удовлетворяло условию (3). Выражение (8) получается после подстановки (7) при $x_l = x_l^0$ в (6) и последующего простого преобразования. □

Задачу (1)–(3) будем представлять как динамическую систему с фазовым пространством $\mathbb{R}^{\mathbb{N}}$, потоком, который в координатах $x = (x_1, x_2, \dots)$ определяется системой уравнений

$$\frac{dx_l}{d\tau} = \frac{1}{2}(x_{l+1} - x_{l-1}), \quad \frac{dx_1}{d\tau} = \frac{1}{2}x_2, \qquad l \geqslant 2, \tag{9}$$

и инвариантной мерой

$$\mu := \prod_{l\geqslant 1} dx_l. \tag{10}$$

Эта динамическая система гамильтонова со скобкой Пуассона

$$\{F,G\} := \frac{1}{2}\sum_{l\geqslant 1}\Big(\frac{\partial F}{\partial x_l}\frac{\partial G}{\partial x_{l+1}} - \frac{\partial F}{\partial x_{l+1}}\frac{\partial G}{\partial x_l}\Big),$$

и гамильтонианом

$$H := \frac{1}{2}\sum_{l\geqslant 1} x_l^2.$$

Рассмотрим теперь случай цепи со свободным концом. Этот случай сводится к уже рассмотренному, если в уравнениях выполнить сдвиг $l\to l-1$. Тогда задача (1)–(3) заменится на задачу

$$\frac{dx_l}{d\tau} = \frac{1}{2}(x_{l+1} - x_{l-1}), \quad l\geqslant 2, \quad t\geqslant 0; \tag{11}$$

$$x_l(0) = x_l^0, \quad l\geqslant 2; \tag{12}$$

$$x_1 = 0, \tag{13}$$

а из теоремы 1 получим

Следствие 1. *Задача (11)–(13) эквивалентна задаче (4), (5), если в качестве начальных условий последней взять условия (12), продолженные на $l\leqslant 1$ посредством соотношения*

$$x_{2-l} = (-1)^l x_l.$$

Задача (11)–(13) имеет решение

$$x_l = \sum_{l'\geqslant 1} x_{l'}^0\big[J_{l'-l}(\tau) + (-1)^l J_{l'+l-2}(\tau)\big].$$

Задаче (11)–(13) отвечает динамическая система с фазовым пространством $\mathbb{R}^{\mathbb{N}\setminus 1}$, потоком, определяемым уравнениями

$$\frac{dx_l}{d\tau} = \frac{1}{2}(x_{l+1} - x_{l-1}), \quad \frac{dx_2}{d\tau} = \frac{1}{2}x_3, \qquad l\geqslant 3,$$

и соответствующей мерой.

2. Статистический ансамбль

Определим, следуя Гиббсу [5], статистическую динамическую систему, соответствующую динамической системе (9), (10). Введем на фазовом пространстве динамической системы нестационарную вероятностную меру $\nu := \rho(\tau,x)\mu$, требуя, чтобы она переносилась потоком. В качестве начальной плотности меры примем

$$\rho(0,x) := \prod_{l\geqslant 1}\delta(x_{2l-1})\frac{1}{\sqrt{2\pi\varkappa T}}\exp\Big[-\frac{x_{2l}^2}{2\varkappa T}\Big], \tag{14}$$

где δ — дельта-функция Дирака, $\varkappa$ — постоянная Больцмана (см. Приложение по поводу обезразмеривания используемых величин) и T — параметр, соответствующий начальной температуре цепи.

При таком выборе начальной плотности для начальной ковариационной матрицы имеем

$$\langle x^0_{2m-1} x^0_n \rangle = 0, \quad \langle x^0_{2m} x^0_n \rangle = \varkappa T \delta_{2m,n}. \tag{15}$$

Положим $\theta_l := \frac{1}{2}\langle x_l x_l \rangle$ и $\phi_l := -\frac{1}{2}\langle x_l x_{l-1}\rangle$. В качестве исследуемых статистических величин, помимо корреляционных функций, будем рассматривать *локальную кинетическую температуру* $T^k_l := \theta_{2l}$, *среднюю локальную температуру* $T_l := \theta_{2l} + \frac{1}{2}(\theta_{2l-1} + \theta_{2l+1})$ и *средний локальный тепловой ток* $\Phi_l := \frac{1}{2}(\phi_{2l-1} + \phi_{2l})$. Температуры T^k_l и T_l ассоциированы с l-ой частицей цепи, ток Φ_l — с участком цепи $(l-1, l)$.

Статистическая динамическая система, соответствующая полубесконечной гармонической цепи со свободным концом, описывается аналогично.

3. Формулы для температуры и теплового тока

Вычислим для статистической динамической системы (9), (10), (14), (15) корреляционные функции, локальные температуры и тепловой ток. Будем использовать тождество

$$\sum_{l\in\mathbb{Z}} J_{2l+m}(t) J_{2l+n}(t) = \frac{1}{2}[\delta_{m,n} + (-1)^n J_{m-n}(2t)], \tag{16}$$

которое является простым следствием теоремы сложения для бесселевых функций [6]. Из соображений краткости положим далее $\varkappa T = 1$.

Из (8), (15) и (16) для корреляционных функций находим

$$\begin{aligned}
\langle x_m x_n \rangle &= \sum_{l\geqslant 1} \big[J_{2l-m}(\tau) - (-1)^m J_{2l+m}(\tau)\big]\big[J_{2l-n}(\tau) - (-1)^n J_{2l+n}(\tau)\big] = \\
&= \sum_{l\in\mathbb{Z}} J_{2l-m}(\tau) J_{2l-n}(\tau) - (-1)^m \sum_{l\in\mathbb{Z}} J_{2l+m}(\tau) J_{2l-n}(\tau) = \\
&= \tfrac{1}{2}[\delta_{m,n} + (-1)^n J_{n-m}(2\tau)] - \tfrac{1}{2}(-1)^m[\delta_{m,-n} + (-1)^n J_{m+n}(2\tau)].
\end{aligned}$$

Отсюда для (локальных) кинетической температуры, средней температуры и среднего теплового тока получаем

$$T^k_l = \tfrac{1}{2}[1 + J_0(2\tau) - J_{4l}(2\tau)], \tag{17}$$

$$T_l = 1 - \tfrac{1}{2}J_{4l}(2\tau) - \tfrac{1}{4}J_{4l-2}(2\tau) - \tfrac{1}{4}J_{4l+2}(2\tau),$$

$$\Phi_l = -\tfrac{1}{4}[J_{4l-3}(2\tau) + J_{4l-1}(2\tau)]. \tag{18}$$

Из (17) следует $\lim_{l\to\infty} T^k_l = \frac{1}{2}[1 + J_0(2\tau)]$, что согласуется с результатом работы [2]. Выражение (18) совпадает с полученным в [1].

Аналогичные вычисления для случая полубесконечной цепи со свободным концом дают

$$\langle x_m x_n\rangle = \tfrac{1}{2}[\delta_{m,n} + (-1)^n J_{n-m}(2\tau)] + \tfrac{1}{2}(-1)^m[\delta_{m-2,-n} + (-1)^n J_{m+n-2}(2\tau)],$$
$$T_l^k = \tfrac{1}{2}[1 + J_0(2\tau) + J_{4l-2}(2\tau)],$$
$$T_l = 1 + \tfrac{1}{2}J_{4l-2}(2\tau) + \tfrac{1}{4}J_{4l-4}(2\tau) + \tfrac{1}{4}J_{4l}(2\tau),$$
$$\Phi_l = \tfrac{1}{4}[J_{4l-5}(2\tau) + J_{4l-3}(2\tau)].$$

4. Приложение

Напомним, что свободные колебания одномерной однородной гармонической цепи, состоящей из частиц массы m и пружин жесткости k, описываются системой уравнений

$$\frac{1}{c^2}\frac{d^2 q_l}{dt^2} - \frac{q_{l-1} - 2q_l + q_{l+1}}{h^2} = 0, \quad c := h\sqrt{\frac{k}{m}}, \tag{19}$$

где q_l — смещение l-ой частицы от ее положения равновесия и h — расстояние между соседними частицами цепи в покое. *Координаты Шредингера* [4] вводятся выражениями

$$x_{2l} := \frac{1}{c}\frac{dq_l}{dt}, \quad x_{2l+1} := \frac{q_{l+1} - q_l}{h}.$$

В этих координатах уравнения (19) принимают вид

$$\frac{1}{c}\frac{dx_l}{dt} - \frac{x_{l+1} - x_{l-1}}{h} = 0.$$

В основной части работы используются безразмерные переменные: время относится к единицам h/c, смещения — к h, энергия и постоянная Больцмана — к kh^2, ток энергии — к ckh. При этом используется временна́я координата $\tau := 2t$.

Список литературы

[1] М. А. Гузев, “Точная формула для температуры одномерного кристалла”, *Дальневост. матем. журн.*, **18**:1, (2018), 34–38.

[2] М. А. Гузев, “Точная формула для температуры одномерного кристалла”, *Дальневост. матем. журн.*, **18**:1, (2018), 39–47.

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

[4] E. Schrödinger, “Zur Dynamik elastisch gekoppelter Punktsysteme”, *Annalen der Physik*, **44**, (1914), 916–934.

[5] J. W. Gibbs, *Elementary principles in statistical mechanics, developed with especial reference to the rational foundation of thermodynamics*, New York, 1902.

[6] G. N. Watson, *A Treatise on the Theory of Bessel Functions*, Cambridge University Press, Cambridge, 1944.

Поступила в редакцию
9 апреля 2020 г.

Gudimenko A. I. Heat flow in a harmonic chain due to an impulse disturbance. *Far Eastern Mathematical Journal.* 2020. V. 20. No 1. P. 52–57.

ABSTRACT

The heat motion in a one-dimensional semi-infinite chain of coupled harmonic oscillators is studied for the Maxwell distribution of initial velocities and zero initial displacements of the chain particles. It is believed that such initial conditions are achieved by an impulse heating of the sample. Exact analytical expressions for the state correlation functions, local temperature, and local heat current of the chain are obtained.

Key words: *harmonic chain, heat flux, Schrödinger variables.*