Вестник
МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
№ 5 — 1968

УДК 539.2.01 : 548

Д. Е. СВЕТОГОРОВ

К СТАТИСТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ СДВИГОВЫХ ВОЛН В КРИСТАЛЛЕ

На основе уравнения Власова изучается распространение установившихся упругих волн в монокристалле, температура которого близка к температуре плавления. Предлагается метод определения нестационарной функции распределения для упругих волн как плотности, так и сдвига. Особое внимание уделено статистическому описанию сдвиговых волн и уяснению механизма возникновения вихревых движений в системе частиц, взаимодействующих посредством центральных потенциальных сил.

В работах Власова [1, 2] развит подход к статистической теории кристалла и разработана проблема стационарных периодических структур на основе уравнения для шестимерной функции распределения $f(\vec{r}, \vec{v}, t)$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v}\nabla_{\vec{r}} f - \frac{1}{m}\nabla_{\vec{v}} f \nabla_{\vec{r}} \int_{(\infty)} K(|\vec{r}-\vec{r}'|) f(\vec{r}', \vec{v}', t)\, d\vec{r}'\, d\vec{v}' = 0, \qquad (1)$$

где $K(|\vec{r}-\vec{r}'|)$ — потенциальная энергия взаимодействия между частицами массы m.

Из динамических процессов в статистической теории кристалла к настоящему времени Головко [3] рассмотрен лишь случай чисто продольных волн плотности, тогда как в кристаллах наблюдаются три ветви упругих колебаний, которые в общем случае имеют как продольные, так и поперечные составляющие смещений [4]. Ниже предложен метод определения нестационарных функций распределения для упругих волн любого типа в случае достаточно высоких температур ($\theta = kT$).

В работе рассматривается лишь простейшая задача, соответствующая неограниченному идеальному монокристаллу из одинаковых частиц. Несмотря на то что подобная модель далека от реального кристалла, она учитывает температурный разброс и отражает ряд основных особенностей кристаллического состояния, а именно: пространственную периодичность и анизотропию. Для настоящего исследования этого вполне достаточно, поскольку основное внимание уделено вскрытию и уяснению механизма возникновения вихревых движений в системе частиц, взаимодействующих посредством центральных потенциальных сил. Причем предполагается, что при температурах ниже температуры плавления частицы образуют устойчивую периодическую структуру. Последнее на данном этапе исследования позволяет ограничиться анализом лишь частных решений типа $\chi(\vec{r}, \vec{v})\, e^{i(\omega t - \vec{k}\vec{r})}$ с действительными k и ω, что должно соответствовать случаю чисто упругих волн.

О методе определения нестационарной функции распределения

Исходное уравнение (1) при некоторых дополнительных условиях, которые будут указаны ниже, имеет стационарное пространственно-периодическое решение [1, 2]. При достаточно высоких температурах оно может быть представлено в виде

$$f(\vec{r}, \vec{v}) = f_0(\vec{v})\,[\rho_0 + \varepsilon\rho_1(\vec{r}) + \varepsilon^2\rho_2(\vec{r}) + \ldots], \qquad (2)$$

где $\varepsilon = \tau^{\frac{1}{m}}$ — некоторый малый параметр, причем τ и m определяются из дополнительных условий; при этом $\rho_n(\vec{r})$ определяются системой уравнений последовательных приближений, которую можно получить, если разложение (2) подставить в исходное уравнение и сравнить порядки.

Нестационарную функцию распределения будем искать в виде

$$f(\vec{r}, \vec{v}, t) = f(\vec{r}, \vec{v}) + \varphi(\vec{r}, \vec{v}, t),$$

где φ — бесконечно малое возмущение стационарной структуры, соответствующее линейной волне. Если нестационарное возмущение представить в виде

$$\varphi(\vec{r}, \vec{v}, t) = \varphi_0(\vec{r}, \vec{v}, t) + \varepsilon\varphi_1(\vec{r}, \vec{v}, t) + \varepsilon^2\varphi_2(\vec{r}, \vec{v}, t) + \ldots$$

и опять произвести сравнение коэффициентов при одинаковых степенях ε, то можно получить к каждому уравнению, определяющему компонент стационарной структуры $\rho_n(\vec{r})$, возмущающее уравнение для определения $\varphi_n(\vec{r}, \vec{v}, t)$. Ниже с помощью указанного метода будут построены и исследованы уравнения первого и второго приближения.

В работе рассматриваются лишь линейные монохроматические волны, поэтому возмущение φ_n, соответствующее плоской волне с волновым вектором $\vec{k}$, можно искать в виде

$$\varphi_n = \chi_n(\vec{r}, \vec{v})\, e^{i(\Omega_n t - \vec{k}\vec{r})},$$

где

$$\Omega_n = \omega + \sum_{j=1}^{n} \varepsilon^j \omega_j.$$

Первое приближение

При исследовании решений нелинейных уравнений методом последовательных приближений анализ первого приближения важен потому, что его частные решения дают информацию о возможных ветвях решений исходного нелинейного уравнения.

В данном случае, учитывая, что $f_0(\vec{v})$ формально всегда удовлетворяет основному уравнению (1), для определения $f, (\vec{r}, \vec{v})$ и $\varphi_0(\vec{r}, \vec{v}, t)$ получаем уравнение

$$\frac{\partial\Phi}{\partial t} + \vec{v}\nabla_{\vec{r}}\Phi - \frac{\rho_0}{m}\nabla_{\vec{v}} f_0(\vec{v})\nabla_{\vec{r}}\int\limits_{(\infty)} K(|\vec{r} - \bar{r}'|)\Phi(\bar{r}', \bar{v}', t)\, d\bar{r}'\, d\bar{v}' = 0. \tag{3}$$

Решения этого уравнения подробно исследованы [1], поэтому лишь кратко приведем некоторые результаты, которые необходимы для дальнейшего.

При условии, что фурье-образ $\sigma(|\vec{k}|)$ потенциальной энергии межмолекулярного взаимодействия $K(|\vec{k}|)$ в некоторой области волновых чисел принимает отрицательные значения $\sigma(k) < 0$ при $k \sim k_0$. Линейное уравнение (3) имеет стационарное решение типа периодической структуры

$$f_1(\vec{r}, \vec{v}) = f_0(\vec{v})\rho_1(\vec{v}) = f_0(\vec{r})\sum_j c_{1j} e^{i\vec{k}_{0j}\vec{r}}. \tag{4}$$

Будем считать, что $f_0(\vec{v})$, за исключением некоторых изолированных точек, совпадает с максвелловским распределением. Указанное решение появляется лишь при достаточно больших концентрациях и низких температурах, причем граница появления определяется условием

$$1 + \frac{\rho_0}{\theta}\sigma(|\vec{k}_0|) = 0. \tag{5}$$

Из нестационарных решений укажем на возмущения типа установившихся волн плотности

$$\varphi_0(\vec{r}, \vec{v}, t) = g_0(\vec{v})\, e^{i(\omega t - \vec{p}\vec{v})}, \tag{6}$$

где $g_0(\vec{v})$ легко определяется непосредственной подстановкой, а ω и $\vec{p}$ связаны дисперсионным уравнением

$$1 + \frac{1}{m}\sigma(|\vec{p}|)\int\limits_{(\infty)} \frac{\vec{p}\nabla_{\vec{v}} f_0(\vec{v})\, d\vec{v}}{\omega - (\vec{p}\vec{v})} = 0.$$

Отметим, что в процессе установления колебаний за счет нелинейного взаимодействия может измениться и сам «фон» $f_0(\vec{v})$ [5], поэтому будем считать, что $\nabla_{\vec{v}} f_0(\vec{v}) = 0$ при $\omega = \vec{k}\vec{v}$, и не исследовать особенность в этой точке.

Разумно предположить, что наряду со стационарными возмущениями (4) возможно существование нестационарных возмущений типа (6), близких по характеру к стационарным:

$$\vec{p} \sim \vec{k}_0; \quad \frac{\omega}{pc} \ll 1,$$

где c — характерная тепловая скорость.

Действительно, если интеграл в правой части дисперсионного уравнения понимать в смысле главного значения, то для максвелловской функции $f_0(\vec{v})$ дисперсионное уравнение можно привести к виду

$$1+2\frac{\rho_0}{\theta}\sigma(|\vec{p}|)\int\limits_0^\infty \chi e^{-x^2}\cos\xi x\,dx=0,$$

где $\xi=\frac{2\omega}{pc}$.

Так как в соответствии с характером искомого решения $\xi\ll 1$, то разлагая подынтегральное выражение в степенной ряд по ξ, получим

$$1+\frac{\rho_0}{\theta}\sigma(|\vec{p}|)\left(1-\frac{1}{2}\frac{4\omega^2}{p^2c^2}+\dots\right)=0. \qquad (7)$$

Из полученного разложения видно, что предположенный тип движения может быть реализован, если $\left|\frac{\rho_0}{\theta}\sigma(|\vec{p}|)\right|\geqslant 1$, но это требование находится в согласии с условием возникновения стационарной структуры (5) и предположением о том, что $p\sim k_0$. Эти нестационарные возмущения имеют характер низкочастотных «микроскопических» возмущений плотности, длина волны которых $\lambda=\frac{2\pi}{p}$ сравнима с периодом кристалла $d=\frac{2\pi}{k_0}$ и, следовательно, они не будут давать непосредственно макроскопических эффектов. Несмотря на это, они могут послужить началом новой ветви нестационарных решений исходного нелинейного уравнения, которая будет давать макроскопические эффекты.

Механизм возникновения вихревых движений

Если в среде произошла кристаллизация, то полученные микроскопические нестационарные возмущения будут взаимодействовать со стационарной структурой, что отразится в появлении последовательности нестационарных возмущений $\varphi_1, \varphi_2\dots\varphi_n\dots$, которые образуют некоторую ветвь нестационарных решений исходного нелинейного уравнения типа линейных волн. Исследуем характер движения, соответствующий этой ветви нестационарных решений на примере возмущения $\varphi_\perp(\vec{r},\vec{v},t)$.

Для определения возмущения φ_1 имеем линейное неоднородное уравнение

$$\frac{\partial\varphi_1}{\partial t}+\vec{v}\nabla_{\vec{r}}\varphi_1-\frac{\rho_0}{m}\nabla_{\vec{v}}f_0\nabla_{\vec{r}}\int\limits_{(\infty)}K(|\vec{r}-\vec{r}'|)\varphi_1(\bar{r}',\bar{v}',t)\,d\bar{r}\,d\bar{v}'=$$

$$=\frac{1}{m}\nabla_{\vec{v}}\varphi_0\nabla_{\vec{r}}\int\limits_{(\infty)}K(|\bar{r}-\bar{r}'|)f_1(r',\bar{v}')\,d\bar{r}'\,d\bar{v}'+$$

$$+\frac{1}{m}\nabla_{\vec{v}}f_1\nabla_{\vec{r}}\int\limits_{(\infty)}K(|\vec{r}-\vec{r}'|)\varphi_0(\bar{r}',v't)\,d\vec{r}'\,d\vec{v}'+i\omega\varphi_0,$$

которое соответствует второму порядку последовательности приближений.

Первые два члена в правой части последнего уравнения отражают мультипликативное взаимодействие нестационарного возмущения $\varphi_0\sim\sim e^{\pm i[\omega t-(\vec{k}+\vec{k}_0)\vec{r}]}$, где $\vec{k}+\vec{k}_0=\vec{p}$, со стационарной структурой $f_1\sim e^{\pm i\vec{k}_0\vec{r}}$. В результате этого «нелинейного» взаимодействия должна появиться комбинационная волна типа $g_1(\vec{v})\, e^{i(\omega t - \vec{k}\vec{r})}$, которая при условии $\vec{p} \sim \vec{k}_0$ будет иметь достаточную длину $\frac{2\pi}{k}$, чтобы давать макроскопические эффекты.

Исследуем характер макродвижения, вызванного этим компонентом нестационарного возмущения. Для этого подставим конкретные значения φ_0 и f_1 и учтем, что $k \ll k_0$. Оставляя лишь определяющие члены, получим

$$g_1(\vec{v}) = \frac{c_\perp q_0}{m}\left[\frac{\sigma(|\vec{k}_0|)}{q_0}\, \vec{k}_0 \nabla_{\vec{v}}\, g_0(\vec{v}) - \sigma(|\vec{k} + \vec{k}_0|)\, \vec{k}_0 \nabla_{\vec{v}}\, f_0(\vec{v})\right],$$

где

$$q_0 = \int\limits_{(\infty)} g_0(\vec{v})\, d\vec{v}.$$

Учитывая, что $f_0(\vec{v})$ и $g_0(\vec{v}) \to 0$ при $|\vec{v}| \to \infty$, то для макропотока получим следующее выражение:

$$\vec{I} = \mathrm{const}\, \vec{k}_0\, e^{i(\omega t - \vec{k}\vec{r})},$$

где

$$\mathrm{const} = \frac{c_1 q_0}{\omega m}\left[\sigma(|\vec{k}_0|) - \sigma(|\vec{k} + \vec{k}_0|)\right].$$

Определяя ротацию полученного потока

$$\mathrm{rot}\, \vec{I} = \mathrm{const}\, [\vec{k}_0\, \vec{k}]\, e^{i\left(\omega t - \vec{k}\vec{r} + \frac{\pi}{2}\right)},$$

видим, что исследуемое нестационарное возмущение имеет отличную от нуля поперечную составляющую и, следовательно, связано с макроскопическими волнами сдвига.

Рассмотрим характер микроскопических изменений, происходящих при этом с периодической структурой. Для этого проинтегрируем выражение

$$f_1(\vec{r}, \vec{v}, t) = f_1(\vec{r}, \vec{v}) + \varphi_1(\vec{r}, \vec{v}, t)$$

по скоростям и получим для общей вариации плотности выражение

$$\rho_1(\vec{r}, t) = c_1 e^{-i\vec{k}_0\vec{r}} + q_1 e^{i[\omega t - (\vec{k} + \vec{k}_0)\vec{r}} + R(\vec{r}, t).$$

Выделенные слагаемые соответствуют периодической структуре и близкому к ней нестационарному возмущению. Подобные комбинации двух близких по характеру волн указывают на амплитудно-фазовую модуляцию [6]. В данном случае на пространственно-временную модуляцию стационарной структуры низкочастотной волной.

Определим фазовую скорость макроскопического компонента, порождаемого возмущением φ_1. Вообще, каждая ступень последовательных приближений наряду с возмущениями φ_n определяет и некоторую поправку к частоте, а следовательно и к фазовой скорости. Непосредственными вычислениями можно убедиться, что поправка ω_1 равна нулю, и поэтому можно исходить из выражения (7), которое удобно представить в виде

$$1 + \frac{\rho_0}{\theta}\left[\sigma(k_0) + \Delta\sigma'(k_0) + \frac{1}{2!}\Delta^2\sigma''(k_0) + \ldots\right] \times$$
$$\times \left(1 - 2\frac{\omega^2}{c^2} \frac{1}{k_0^2 + 2k_0 k\cos\beta + k^2} + \ldots\right) = 0,$$

где

$$\sigma\left(\sqrt{k_0^2+2k_0k\cos\beta+k^2}\right)=\sigma(k_0+\Delta),\qquad \cos\beta=\frac{(\vec{k}\,\vec{k}_0)}{kk_0},$$

$$\Delta=\frac{1}{2}k_0\left(2\frac{k}{k_0}\cos\beta+\frac{k^2}{k_0^2}\right)-\frac{1}{2\cdot 4}k_0\left(2\frac{k}{k_0}\cos\beta+\frac{k^2}{k_0^2}\right)^2+\dots$$

Из последнего выражения для случая «квазипоперечных» волн $\cos\beta\sim 0$, учитывая, что $k\ll k_0$ и $\frac{\rho_0}{\theta}\sigma(k_0)\sim 1$, получим для фазовой скорости следующее выражение:

$$u_{\text{ф}}^{(1)}=\frac{1}{4}c^2\frac{k_0\sigma'(k_0)}{\sigma(k_0)}.$$

Отсюда следует, что $\sigma(k)$ в области $k\sim k_0$ должна быть убывающей функцией. Если же окажется, что $\sigma'(k_0)=0$, то необходимо учесть ряд последующих членов разложения.

Последовательный учет высших приближений в принципе возможен, но из-за быстрого возрастания объема вычислений практически мало интересен.

Проведенный анализ микроскопических решений типа сдвиговых волн указывает, что несмотря на то, что частицы взаимодействуют посредством центральных потенциальных сил, в среде возможны вихревые макродвижения, если частицы образуют анизотропную структуру. Именно за счет мультипликативного взаимодействия между анизотропной структурой и нестационарным возмущением возникают движения и силы вихревого характера.

С микроскопической точки зрения при этом происходят малые отклонения от чистой периодичности в существующей структуре.

Автор благодарен проф. А. А. Власову за предложенную тему и помощь в работе.

ЛИТЕРАТУРА

1. Власов А. А. Теория многих частиц. М., Гостехиздат, 1950.
2. Власов А. А. Статистические функции распределения. М., «Наука», 1966.
3. Головко В. А. «Вестн. Моск. ун-та», сер. физ., астрон., № 2, 85—93, 1967.
4. Федоров Ф. И. Теория упругих волн в кристаллах. М., «Наука», 1965.
5. Головко В. А. ЖЭТФ, 47, 1765—1771, 1964.
6. Рытов С. М. Автореферат докторской диссертации, ФИАН, 1938.

Поступила в редакцию
27.9 1967 г.

Кафедра
теоретической физики