УДК 534.2:530.I0

РАСПРОСТРАНЕНИЕ ВОЗБУЖДЕНИЙ ОТ ТОЧЕЧНОГО ИСТОЧНИКА В ТРЕХМЕРНЫХ ПЕРИОДИЧЕСКИХ РЕШЕТКАХ

В.Л. Дятлов

Задачи физики твердого тела, связанные с рассмотрением процессов в кристаллической решетке, сводятся к решению трехмерных дифференциально-разностных уравнений.

Как правило, эти задачи анализируются либо на базе дифференциально-разностных уравнений для плоских волн, либо приближенно формулируются непрерывными дифференциальными уравнениями в частных производных, аппарат которых хорошо разработан. При этом не рассматриваются прямые решения дифференциально-разностных уравнений для случаев, когда невозможно пользоваться частными решениями в форме плоских волн. В то же время хорошо известно, что пренебрежение дискретной структурой кристаллов в некоторых случаях влечет за собой не только количественные, но и качественно неверные результаты, например, при рассмотрении оптических колебаний решетки [I].

Использование идей Г.Бейтмена [2,3], который нашел решения задач распространения волн и диффузии вещества (тепла) в двумерных сетях от действия точечного источника, позволяет найти подходы к прямому решению, по крайней мере, наиболее простых трехмерных линейных дифференциально-разностных уравнений, часто встречающихся в физике твердого тела [I].

I. Рассмотрим дифференциально-разностное уравнение, описывающее однородную решетку, вида:

$$\Delta u_{x_1,x_2,x_3} - a u_{x_1,x_2,x_3} = -b f^{(\kappa)} \delta^{(\kappa)}, \qquad (I)$$

где u_{x_1,x_2,x_3} – искомая функция трех целочисленных переменных x_1, x_2, x_3;

$$\Delta u_{x_1,x_2,x_3} = u_{x_1+1,x_2,x_3} + u_{x_1-1,x_2,x_3} - 2u_{x_1,x_2,x_3} + u_{x_1,x_2+1} + u_{x_1,x_2-1,x_3} - 2u_{x_1,x_2,x_3} + u_{x_1,x_2,x_3+1} + u_{x_1,x_2,x_3-1} - 2u_{x_1,x_2,x_3};$$

a, b – преобразование Фурье или Лапласа операторов дифференцирования по времени;

$\delta^{(\kappa)} = \delta(x_1 - x_1^{(\kappa)}, x_2 - x_2^{(\kappa)}, x_3 - x_3^{(\kappa)}) = 1$ при $x_1 = x_1^{(\kappa)}$, $x_2 = x_2^{(\kappa)}$, $x_3 = x_3^{(\kappa)}$ и $\delta^{(\kappa)} = 0$ при хотя бы одном $x_i \neq x_i^{(\kappa)}$ $(i = 1,2,3)$;

$f^{(\kappa)}$ – преобразование Фурье или Лапласа временной зависимости возбуждения в точке $x_1^{(\kappa)}, x_2^{(\kappa)}, x_3^{(\kappa)}$.

Уравнение (I) рассмотрим для области, бесконечно протяженной по координатам x_1, x_2, x_3 при нулевых условиях на бесконечности. Его решение при этом будем иметь вид:

$$u_{x_1,x_2,x_3} = f^{(\kappa)} \frac{b}{a} \int_0^\infty e^{-\left(\frac{a+b}{a}\right)\xi} \prod_{i=1}^{3} I_{x_i - x_i^{(\kappa)}}\left(\frac{2\xi}{a}\right) d\xi =$$

$$= f^{(\kappa)} \frac{b}{a} B^{(\kappa)}_{x_1 - x_1^{(\kappa)}, x_2 - x_2^{(\kappa)}, x_3 - x_3^{(\kappa)}}(a), \qquad (2)$$

где $I_{x_i - x_i^{(\kappa)}}\left(\frac{2\xi}{a}\right)$ – функция Бесселя мнимого аргумента, порядка $x_i - x_i^{(\kappa)}$. Действительно, можно проверить, что функция

$$B^{(\kappa)}_{x_1 - x_1^{(\kappa)}, x_2 - x_2^{(\kappa)}, x_3 - x_3^{(\kappa)}}(a) = B^{(\kappa)}(a)^{*)}$$

обладает свойством:

$$\Delta B^{(\kappa)}(a) = a B^{(\kappa)}(a) - a\delta^{(\kappa)}; \qquad (3)$$

*) Индекс "κ" функции $B^{(\kappa)}(a)$ означает, что отсчет координат производится от точки с номером κ.

откуда следует, что выражение (2) для u_{x_1,x_2,x_3} удовлетворяет уравнению (I).

Функция $B^{(\kappa)}(\alpha)$, которую назовем функцией Бейтмена, удовлетворяет нулевым граничным условиям на бесконечности при $-12 > Re\,\alpha > 0$.

2. Свойство (3) функций Бейтмена показывает возможность получения аналитического решения систем уравнений типа (I):

$$\Delta u_i - \sum_{j=1}^{m} a_{ij} u_j = - b_i f_i^{(\kappa)} \delta^{(\kappa)}, \qquad i = 1, 2, \ldots, m. \tag{4}$$

Это решение будет иметь вид:

$$u_i = \sum_{\kappa=1}^{m} \sum_{t=1}^{m} c_{\kappa t}^{(i)} B^{(\kappa)}(S_t), \tag{5}$$

где m корней S_t определяются из алгебраического характеристического уравнения системы (4), а коэффициенты $c_{\kappa t}^{(i)}$ – из системы алгебраических уравнений, получаемых после подстановки (5) в (4) и приравнивания нулю коэффициентов при линейно независимых функциях $B^{(\kappa)}(S_t)$ (для разных κ и t при отсутствии кратных корней S_t) и при каждом из индексов Кронекера $\delta^{(\kappa)}$.

Система уравнений (4) позволяет описать процессы в кристалле, состоящем из атомов m сортов.

3. При анизотропии по осям x_i уравнение (I) можно представить так:

$$\sum_{i=1}^{3} \frac{1}{a_i} (u_{x_i+1} + u_{x_i-1} - 2u_{x_i}) - u_{x_1,x_2,x_3} = - b f^{(\kappa)} \delta^{(\kappa)} \tag{6}$$

Уравнение (6) имеет аналитическое решение вида:

$$u_{x_1,x_2,x_3} = b\int_0^\infty e^{-(1+\frac{2}{a_1}+\frac{2}{a_2}+\frac{2}{a_3})\xi} \prod_{i=1}^{3} I_{x_i - x_i^{(\kappa)}}\left(\frac{2\xi}{a_i}\right) d\xi = b B^{(\kappa)}(a_1, a_2, a_3). \tag{7}$$

4. Предположим, что в однородной решетке, описываемой уравнением (I), имеется одно нарушение (вакансия, замещенный атом), то есть в некоторой точке z значение $a_z \neq a$. В этом случае уравнение (I) можно представить так:

$$\Delta u - a u = - b\delta^{(\kappa)} f^{(\kappa)} - (a - a_z) u_z \delta^{(z)}. \tag{8}$$

Решение (8) будет иметь вид:

$$u = \frac{b}{a} f^{(\kappa)} B^{(\kappa)}(a) + \left(1 - \frac{a_z}{a}\right) u_z B^{(z)}(a), \tag{9}$$

и в точке z:

$$u_z = \frac{b}{a} f^{(\kappa)} B_z^{(\kappa)}(a) + \left(1 - \frac{a_z}{a}\right) u_z B_z^{(z)}(a).^{*)}$$

С помощью (9), после подстановки в него выражения для u_z, согласно (I0), можно оценить влияние различных неоднородностей на процессы распространения возмущений в кристаллической решетке.

Итак, с помощью функций Бейтмена, используя также принцип суперпозиции, можно найти прямое решение весьма большого числа линейных задач физики твердого тела, описываемых дифференциально-разностными уравнениями. Не вызывает сомнения возможность решения с помощью функций Бейтмена ряда аналогичных слабо нелинейных задач методами малого параметра.

Литература

I. КИТТЕЛЬ Ч. Введение в физику твердого тела. Издание второе, переработанное, I962, М. ГИФ-МЛ, стр. I06-I4I.

2. BATEMAN H. Some simple differential difference equations and the related functions. Bull. Amer. Math. Soc., 49, 1943, 494-512.

3. ПИННИ Э. Обыкновенные дифференциально-разностные уравнения, I96I, М., ИИЛ, стр. I48-I53.

Поступила в редакцию
I0. I2. I970 г.

*) $B_z^{(\kappa)}(a)$ – коэффициент, получаемый из функции Бейтмена при подстановке разности координат $x_i^{(z)} - x_i^{(\kappa)}$, i =I,2,3; $B_z^{(z)} = \int_0^\infty e^{-(\frac{a+6}{a})\xi} I_0^3\left(\frac{2\xi}{a}\right) d\xi$.