

Dynamika jednowymiarowego łańcucha atomów

Paweł Lipiór

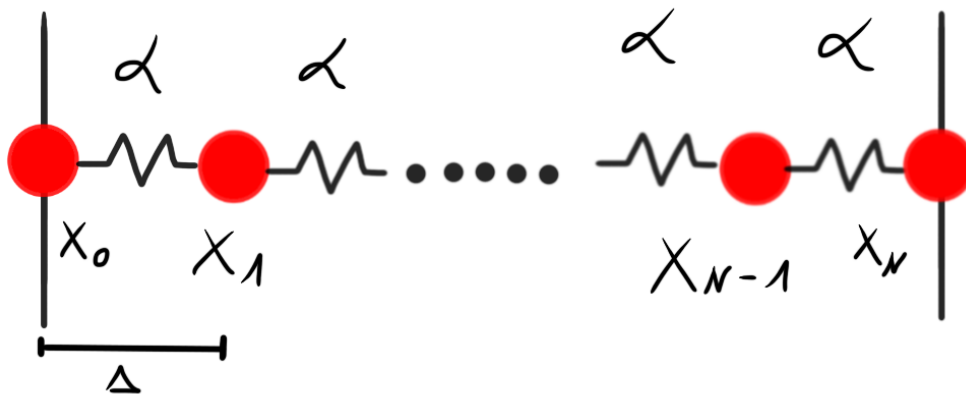
17 maja 2020

1 Wstęp

Tematem odbytych zajęć laboratoryjnych było zastosowanie komputerowych metod obliczeniowych do symulacji dynamiki jednowymiarowego łańcucha atomów. Dokonano symulacji propagacji zaburzenia w łańcuchu atomów. Następnie dokonano symulacji dla warunków rezonansu mechanicznego. W obliczeniach użyto metody RK4 służącej do iteracyjnego rozwiązywania równań różniczkowych zwyczajnych. Zebrane wyniki przedstawiono na wykresach. Zbadano rozwiązania dla różnych parametrów.

2 Wstęp teoretyczny

Podczas trwania zajęć laboratoryjnych wykorzystano Mechanikę Lagrange'a do za symulowania szczególnych przypadków dynamiki jednowymiarowego łańcucha atomów. Przykładowy model takiego łańcucha przedstawia rysunek 1:



Rysunek 1: Jednowymiarowy łańcuch atomów

Na rysunku zaznaczono $N + 1$ atomów numerowanych jako $i = 1, 2 \dots N$, każdy o masie m "połączony" oddziaływaniem sprężystym o współczynniku α . Położenia każdego atomu opisywane są funkcją $x_i(t)$. W spoczynku położenia te dane są zależnością $x_i = \Delta \cdot i$, gdzie $i = 1, 2 \dots N$, Δ – odległość między atomami. Przyjmujemy, że położenia atomów 1 oraz N są stałe i wynoszą kolejno $x_0 = x_{min} = 0$ oraz $x_N = x_{max} = \Delta \cdot N$. Zakładamy iż każdy atom oddziałuje oddziaływaniem sprężystym tylko z najbliższymi skrajnymi sąsiadami. Oddziaływanie pomiędzy sąsiednimi atomami i, j opisuje wzór:

$$U_{i,j} = \frac{\alpha}{2} \left[(x_i - \Delta \cdot i) - (x_j - \Delta \cdot j) \right]^2 \quad (1)$$

2.1 Formalizm Lagrange'a

W celu napisania równań ruchu zapisujemy Lagranżjan układu:

$$L = T - U$$

Dla energii kinetycznej:

$$T = \sum_{i=0}^N T_i = \sum_{i=0}^N \frac{m}{2} \dot{x}_i^2$$

Oraz dla energii potencjalnej:

$$U = \sum_{i=1}^N U_{i-1,i} = \sum_{i=1}^N \frac{\alpha}{2} (x_{i-1} - x_i + \Delta)^2$$

Następnie korzystając z równania Eulera-Lagrange'a:

$$\frac{\partial L}{\partial x_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} = 0$$

Otrzymujemy równanie ruchu:

$$\ddot{x}_i = \frac{\alpha}{2} (x_{i-1} - 2x_i + x_{i+1}) \quad (2)$$

2.2 Drgania własne układu

Jako iż położenia atomów na krańcach łańcucha są ustalone to jednym z możliwych rozwiązań powyższego równania będzie fala stojąca, gdzie wszystkie atomy drgają z jednakową częstością. Takie rozwiązanie z względu na warunek brzegowy przyjmuje postać:

$$x_i(t) = x_i(t=0) + A_i \cdot \sin(kx_i) \cos(\omega t)$$

gdzie A_i - amplituda drgań i -tego atomu, k - liczba falowa, ω - częstość drgań.

Po wstawieniu powyższego równania do równania ruchu 2 i kilku przekształceniach trygonometrycznych otrzymujemy:

$$\sin(k_{i\pm 1}) = \sin(kx \pm k\Delta) = \sin(kx) \cos(k\Delta) \pm \sin(k\Delta) \cos(kx)$$

z czego otrzymujemy:

$$\omega^2 = 4 \frac{\alpha}{m} \sin^2\left(\frac{k\Delta}{2}\right)$$

z warunku brzegowego:

$$kx_{max} = n\pi, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

dla $x_{max} = \Delta \cdot N$ otrzymujemy relację:

$$k = \frac{n\pi}{\Delta \cdot N}$$

oraz relację dyspersji $\omega(k)$:

$$\omega_n = 2\sqrt{\frac{\alpha}{m}} \left| \sin \frac{n\pi}{2N} \right| \quad (3)$$

3 Metoda obliczeń numerycznych

3.1 Metoda Rungego-Kutty 4-tego rzędu

Do rozwiązania układu równań ruchu można użyć metod numerycznych. Aby wyniki były zadowalającej jakości postanowiono użyć metody Rungego-Kutty czwartego rzędu. Cechuje się ona błędem lokalnym na poziomie $O(\Delta t^5)$. Jest ona zdefiniowana następująco:

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{s}}{dt} &= f(t, \vec{s}) \\ \vec{k}_1 &= f(t_i, \vec{s}_i) \\ \vec{k}_2 &= f\left(t_i + \frac{\Delta t}{2}, \vec{s}_i + \frac{\Delta t \vec{k}_1}{2}\right) \\ \vec{k}_3 &= f\left(t_i + \frac{\Delta t}{2}, \vec{s}_i + \frac{\Delta t \vec{k}_2}{2}\right) \\ \vec{k}_4 &= f(t_i + \Delta t, \vec{s}_i + \Delta t \vec{k}_3) \\ \vec{s}_{i+1} &= \vec{s}_i + \frac{\Delta t}{6}(\vec{k}_1 + 2\vec{k}_2 + 2\vec{k}_3 + \vec{k}_4) \end{aligned}$$

Podaną powyżej metodę zaimplementowano w programie komputerowym służącym do symulacji dynamiki jednowymiarowego łańcucha atomów.

3.2 Ewolucja czasowa

Jak można zauważyć metoda RK4 służy do rozwiązywania układów równań różniczkowych zwyczajnych pierwszego rzędu. Ale możemy, w łatwy sposób, zamienić układ równań różniczkowych rzędu drugiego na układ równań różniczkowych zwyczajnych rzędu pierwszego. Dokonujemy symulacji łańcucha $N+1$ atomów w czasie więc musimy dokonać iteracji po każdym atomie w łańcuchu. W celu użycia metody RK4 dokonujemy podstawienia:

$$\begin{aligned} s_{0_i} &= x_i \\ s_{1_i} &= \dot{x}_i \end{aligned}$$

Następnie określamy ich pochodne:

$$\begin{aligned}\dot{s}_{0_i} &= s_{1_i} \\ \dot{s}_{1_i} &= \frac{\alpha}{m}(s_{0_{i-1}} - 2s_{0_i} + s_{0_{i+1}})\end{aligned}$$

Ustawiamy sztywne warunki brzegowe:

$$\begin{aligned}\dot{s}_{0_0} &= 0 \\ \dot{s}_{0_N} &= 0 \\ \dot{s}_{1_0} &= 0 \\ \dot{s}_{1_N} &= 0\end{aligned}$$

Otrzymany układ równań rozwiązujemy numeryczną iteracją metody RK4 przyjmując zadane warunki brzegowe i początkowe.

4 Przeprowadzenie obliczeń

Do przeprowadzenia symulacji dynamiki jednowymiarowego łańcucha atomów wykorzystano własny program obliczeniowy wykorzystujący opisaną powyżej metodę RK4. W obliczeniach przyjęto następujące warunki:

- $N = 50$
- $\Delta t = 0.02$
- $\Delta = 0.01$
- $\alpha = 1$
- $m = 1$

4.1 Propagacja zaburzenia w łańcuchu atomów

Jako warunek początkowy położenia cząstek przyjęto rozkład:

$$s_{0_i} = x_i(t=0) + \frac{\Delta}{2} \exp\left(-\frac{(x_i(t=0) - \frac{x_{max}}{2})^2}{2\sigma^2}\right), \quad i = 0, 1, 2, \dots, N$$

gdzie $\sigma = 3 \cdot \Delta$ oraz brak początkowej prędkości liniowej. Symulację wykonano dla $n_t = 5000$ kroków czasowych. Sporządzono wykresy energii kinetycznej, potencjalnej i całkowitej układu w funkcji czasu. Sporządzono wykres fazowy $u(x, t)$ pokazujący wychylenia atomów z położenia równowagi w funkcji czasu.

4.2 Rezonans mechaniczny

Jako warunek początkowy położenia atomów przyjęto położenia równowagi oraz brak początkowej prędkości liniowej.

Określono częstość siły wymuszającej korzystając ze wzoru 3. Ustawiono czas prowadzenia symulacji $t_{max} = 20 \cdot \frac{2\pi}{\omega_n}$, a liczbę kroków czasowych jako $n_t = [int] \frac{t_{max}}{\Delta t}$.

Atom o numerze $i = 1$ pobudzono siłą $F = 0.01$ zadaną częstością ω_n . W tym celu zmodyfikowano jego pochodną w metodzie RK4 na:

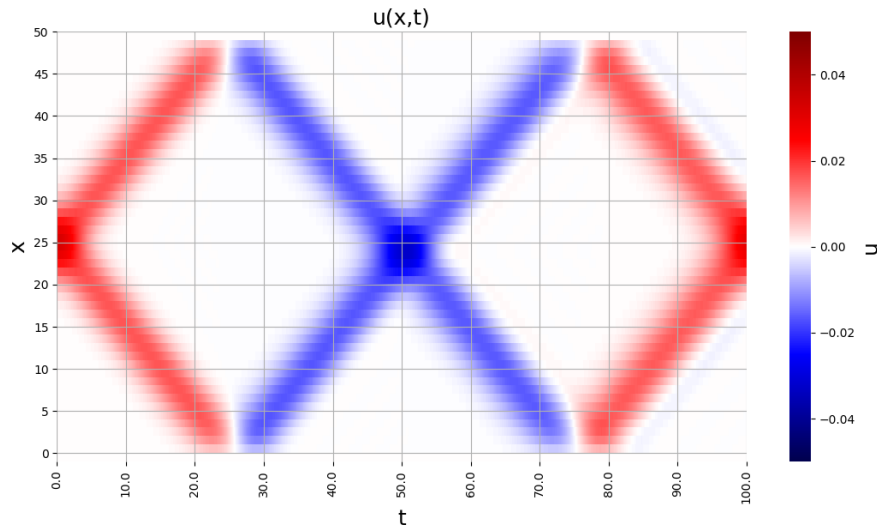
$$\dot{s}_{1_i} = \frac{\alpha}{m}(s_{0_{i-1}} - 2s_{0_i} + s_{0_{i+1}}) + \frac{F}{m} \sin(\omega_n t)$$

Symulację prowadzono dla zadanych $n = [0.9, 1.0, 1.1, 1.5, .20, 5.0]$. Sporządzono wykres fazowy $u(x, t)$ pokazujący wychylenia atomów z położenia równowagi w funkcji czasu.

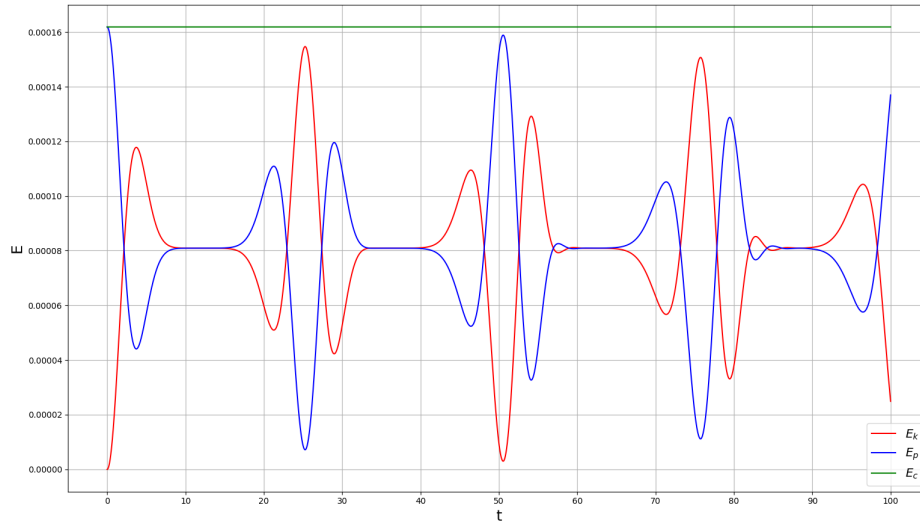
5 Wyniki symulacji

5.1 Zaburzenie w łańcuchu atomów

Za pomocą własnego programu komputerowego dokonano symulacji dynamiki jednowymiarowego łańcucha atomów o zadanych w punkcie powyżej parametrach. Wyniki przedstawiono na rysunkach 2 oraz 3.



Rysunek 2: Wykres wychylenia $u(x,t)$ atomów z położenia równowagi.



Rysunek 3: Wykres energii kinetycznej, potencjalnej i całkowitej układu łańcucha atomów.

Na rysunku 2 możemy zauważyć iż fala obrazująca wychylenie atomów z położenia równowagi przechodzi na przemian z wartości dodatnich do ujemnych. Zauważamy, że po czasie półokresu drgań tej fali pojawia się kolejny obraz fali o przeciwnej fazie. Obraz ten powstaje najpewniej na skutek ustalania się kolejnych częstości drgań atomów w łańcuchu.

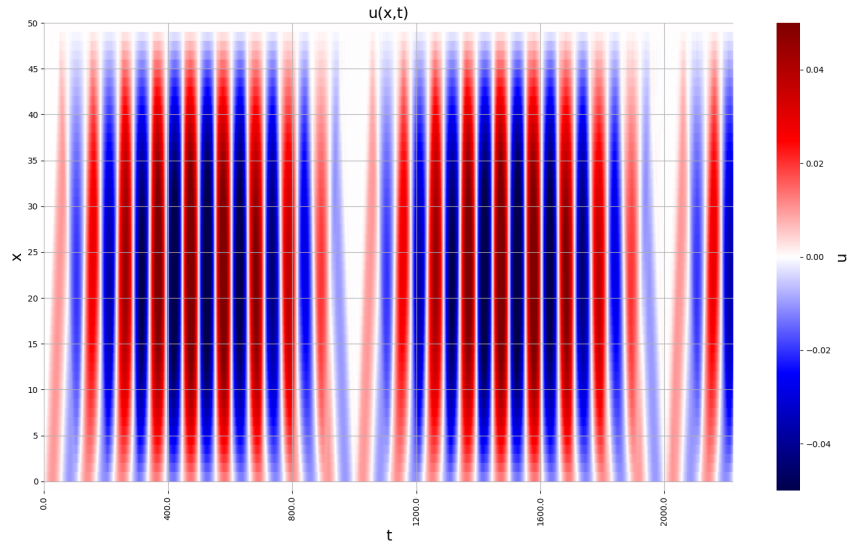
Na rysunku 3 zaznaczono energię kinetyczną, potencjalną i całkowitą układu. Ustalona wartość energii całkowitej układu świadczy o dobrych jakościowo wynikach symulacji, gdyż energia układu izolowanego jest zachowana. Zauważamy, iż energia potencjalna stopniowo przechodzi w energię kinetyczną i odwrotnie. Na wykresie zauważamy także opisane powyżej kolejne obrazy fal. Zauważamy, iż zmniejsza się amplituda wychylenia atomów z położenia równowagi kosztem powstawania nowych obrazów fal.

5.2 Rezonans mechaniczny

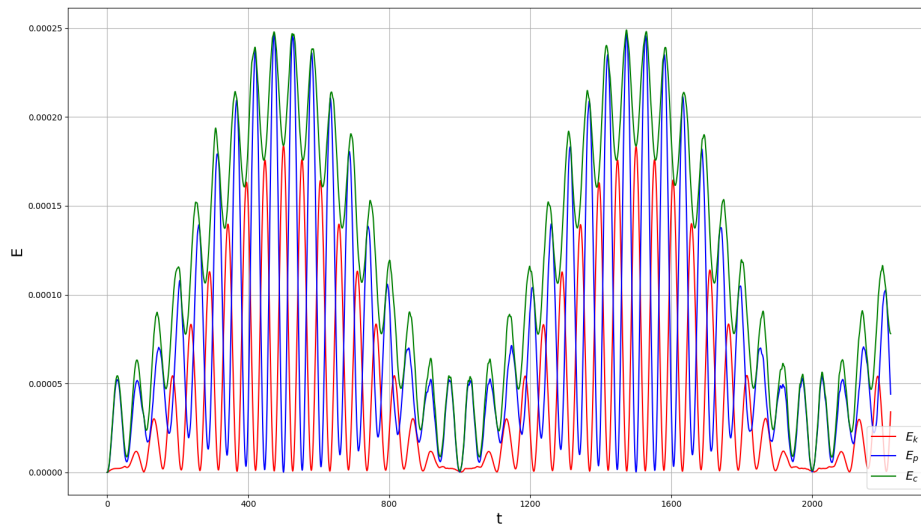
Za pomocą własnego programu komputerowego dokonano symulacji dynamiki jednowymiarowego łańcucha atomów o zadanych w punkcie powyżej parametrach.

Parametr: $n = 0.9$

Wyniki symulacji dla parametru $n = 0.9$ przedstawiono na rysunkach 4 oraz 5.



Rysunek 4: Wykres wychyleń $u(x,t)$ atomów z położenia równowagi dla $n = 0.9$.



Rysunek 5: Wykres energii kinetycznej, potencjalnej i całkowitej układu łańcucha atomów dla $n = 0.9$.

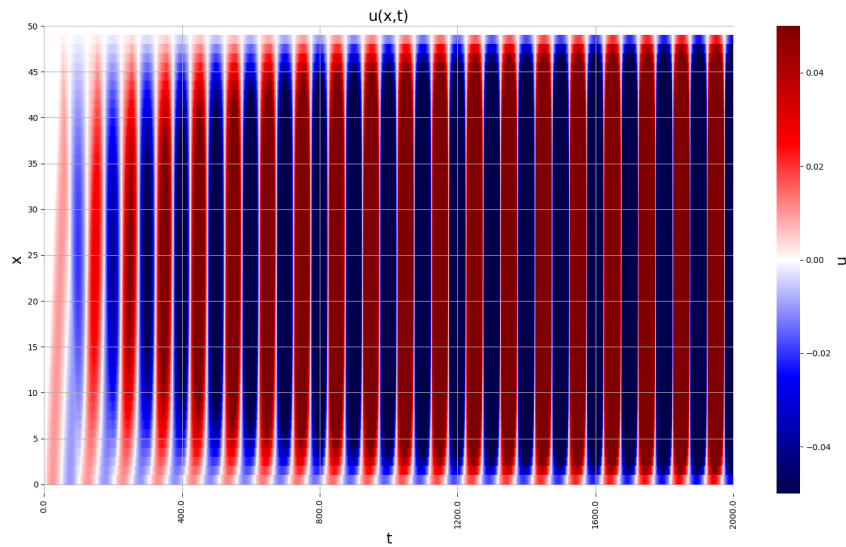
Na wykresie 4 zauważamy, iż fala obrazująca wychylenie z położenia równowagi stopniowo rozchodzi się w łańcuchu atomów, kolejno osiąga wartość maksymalną i powraca do stanu począt-

kowego. Nie następuje ciągły wzrost wartości amplitudy drgań atomów. Nie został spełniony warunek rezonansu mechanicznego.

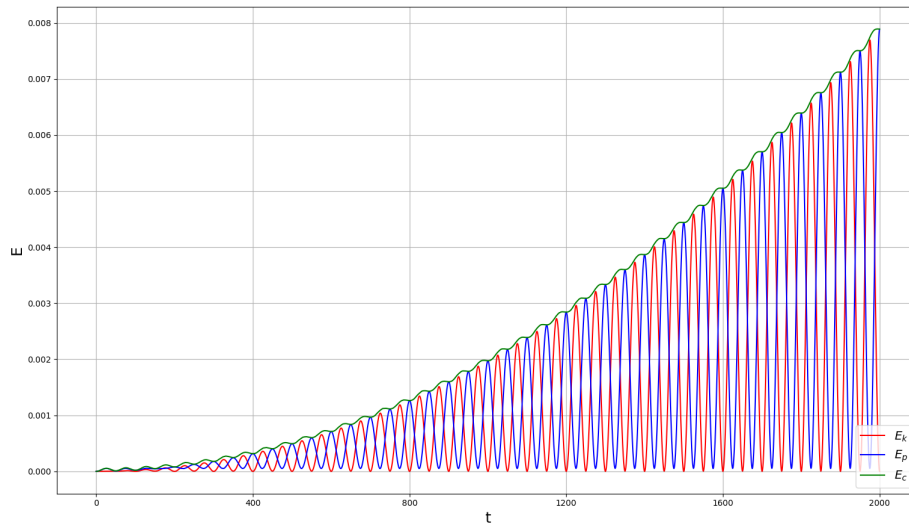
Na rysunku 5 zaznaczono energię kinetyczną, potencjalną i całkowitą układu. Zauważamy iż energia układu stopniowo rośnie, osiąga wartość maksymalną i kolejno spada do wartości początkowej. Nie następuje ciągły wzrost energii całkowitej układu. Warunek rezonansu mechanicznego nie został spełniony.

Parametr: $n = 1.0$

Wyniki symulacji dla parametru $n = 1.0$ przedstawiono na rysunkach 6 oraz 7.



Rysunek 6: Wykres wychYLENIA $u(x,t)$ atomów z położenia równowagi dla $n = 1.0$.



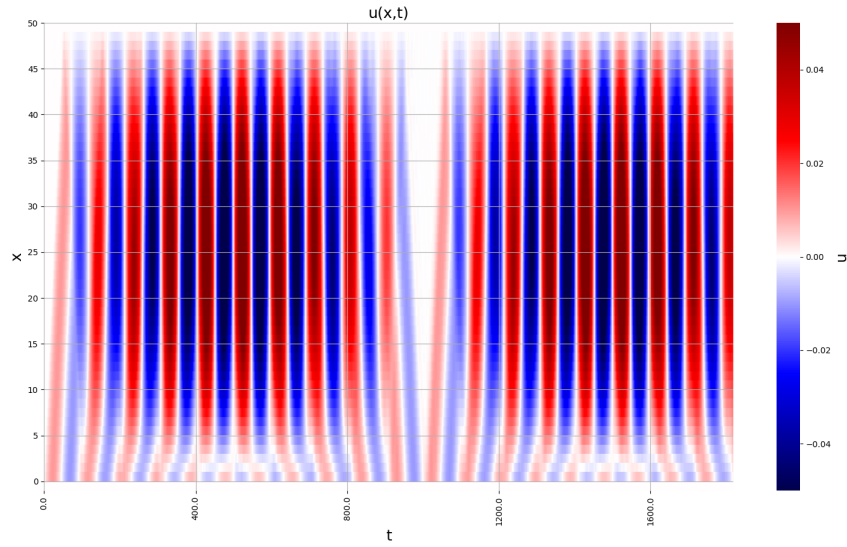
Rysunek 7: Wykres energii kinetycznej, potencjalnej i całkowitej układu łańcucha atomów dla $n = 1.0$.

Na wykresie 6 zauważamy, iż fala obrazująca wychylenie z położenia równowagi stopniowo rozchodzi się w łańcuchu atomów. Amplituda wychyleń atomów z położenia równowagi nieustannie rośnie, a samym rozwiązaniem fali jest jedna fala stojąca. Warunek rezonansowy został spełniony.

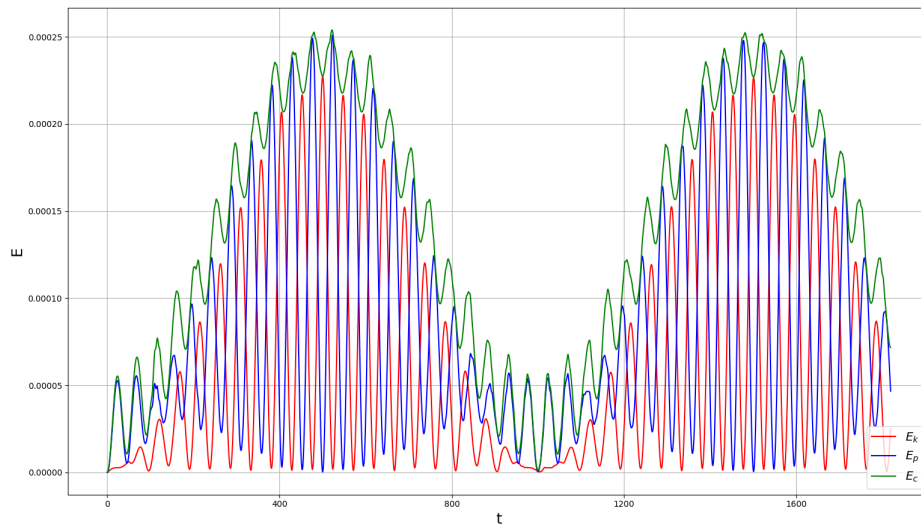
Na rysunku 7 zaznaczono energię kinetyczną, potencjalną i całkowitą układu. Zauważamy iż energia układu nieustannie rośnie. Zatem warunek zajścia rezonansu mechanicznego został spełniony.

Parametr: $n = 1.1$

Wyniki symulacji dla parametru $n = 1.1$ przedstawiono na rysunkach 8 oraz 9.



Rysunek 8: Wykres wychylecia $u(x,t)$ atomów z położenia równowagi dla $n = 1.1$.



Rysunek 9: Wykres energii kinetycznej, potencjalnej i całkowitej układu łańcucha atomów dla $n = 1.1$.

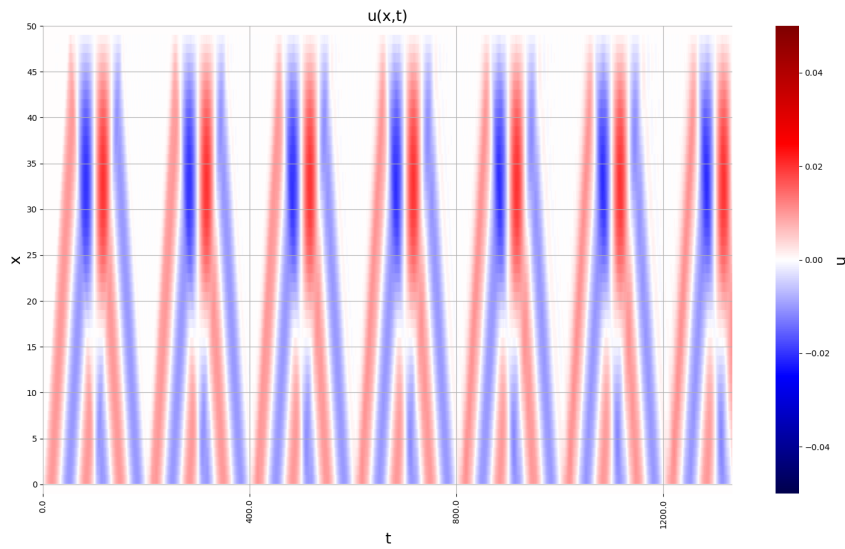
Na wykresie 8 zauważamy, iż fala obrazująca wychylenie z położenia równowagi stopniowo rozchodzi się w łańcuchu atomów, kolejno osiąga wartość maksymalną i powraca do stanu początko-

wego. Ujawnia się także pewne zaburzenie w okolicach 3 czy 4 atomu. Nie następuje ciągły wzrost wartości amplitudy drgań atomów. Nie został spełniony warunek rezonansu mechanicznego.

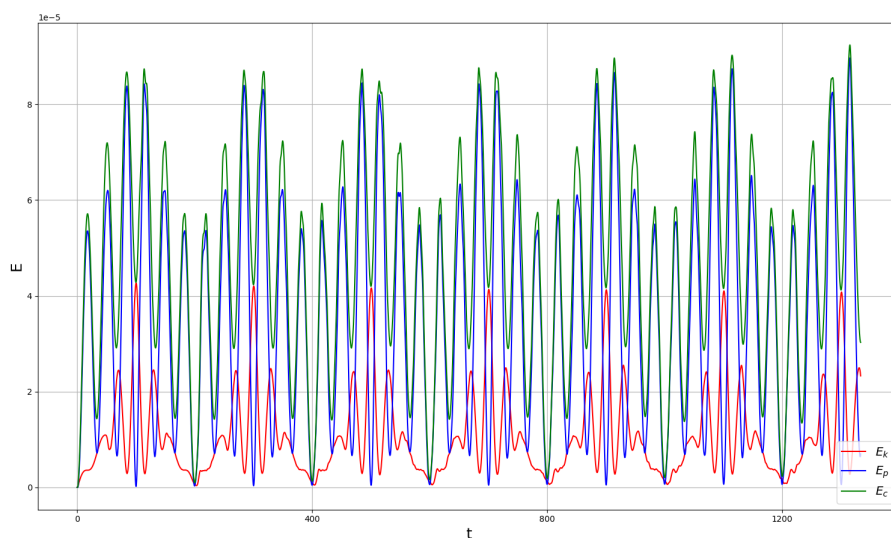
Na rysunku 9 zaznaczono energię kinetyczną, potencjalną i całkowitą układu. Zauważamy iż energia układu stopniowo rośnie, osiąga wartość maksymalną i kolejno spada do wartości początkowej. Nie następuje ciągły wzrost energii całkowitej układu. Warunek rezonansu mechanicznego nie został spełniony.

Parametr: $n = 1.5$

Wyniki symulacji dla parametru $n = 1.5$ przedstawiono na rysunkach 10 oraz 11.



Rysunek 10: Wykres wychyleń $u(x,t)$ atomów z położenia równowagi dla $n = 1.5$.



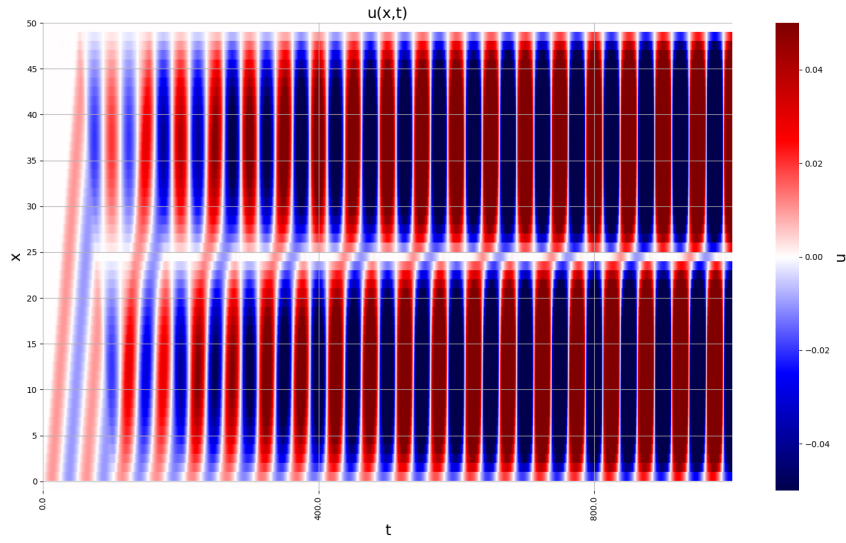
Rysunek 11: Wykres energii kinetycznej, potencjalnej i całkowitej układu łańcucha atomów dla $n = 1.5$.

Na wykresie 10 zauważamy, iż fala obrazująca wychylenie z położenia równowagi rozchodzi się i gaśnie bardzo szybko, wykonując tylko kilka okresów drgań. Pojawia się pewne zaburzenie dla atomu 15 czy 16. Nie następuje ciągły wzrost wartości amplitudy drgań atomów. Nie został spełniony warunek rezonansu mechanicznego.

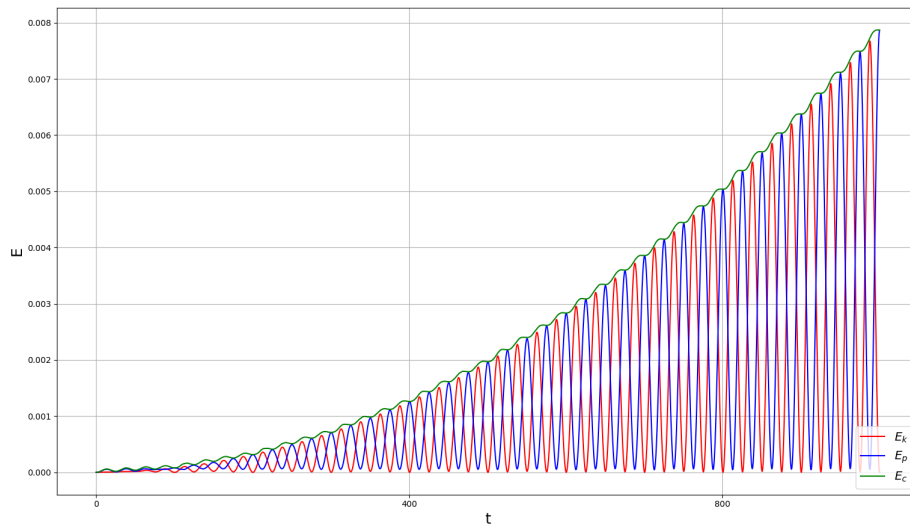
Na rysunku 11 zaznaczono energię kinetyczną, potencjalną i całkowitą układu. Zauważamy iż energia układu stopniowo rośnie, osiąga wartość maksymalną i kolejno spada do wartości początkowej. Same zmiany są dość szybkie i gwałtowne. Nie następuje ciągły wzrost energii całkowitej układu. Warunek rezonansu mechanicznego nie został spełniony.

Parametr: $n = 2.0$

Wyniki symulacji dla parametru $n = 2.0$ przedstawiono na rysunkach 12 oraz 13.



Rysunek 12: Wykres wychylenia $u(x,t)$ atomów z położenia równowagi dla $n = 2.0$.



Rysunek 13: Wykres energii kinetycznej, potencjalnej i całkowitej układu łańcucha atomów dla $n = 2.0$.

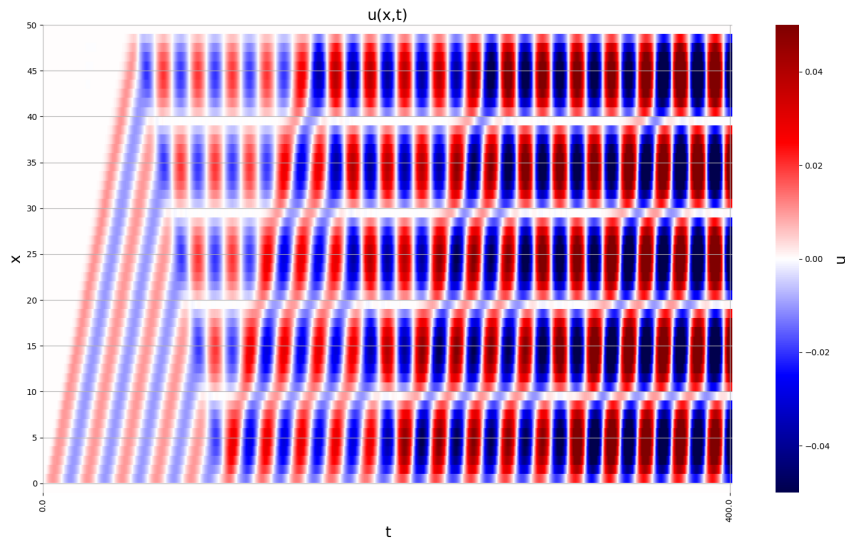
Na wykresie 12 zauważamy, iż fala obrazująca wychylenie z położenia równowagi stopniowo rozchodzi się w łańcuchu atomów. Amplituda wychyleń atomów z położenia równowagi nieustannie

rośnie, a samym rozwiązaniem fali są dwie fale stojące, które stają się zauważalne dopiero po osiągnięciu przez układ pewnej energii. Warunek rezonansowy został spełniony.

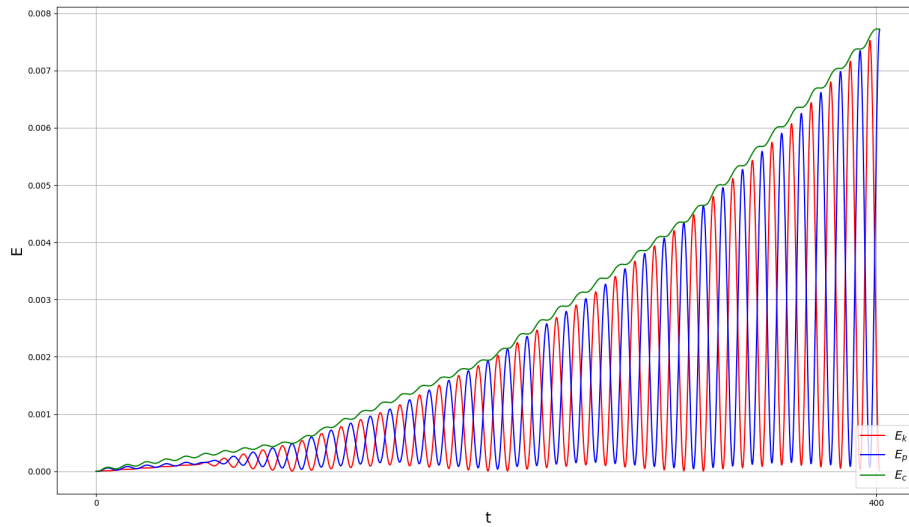
Na rysunku 7 zaznaczono energię kinetyczną, potencjalną i całkowitą układu. Zauważamy iż energia układu nieustannie rośnie. Zatem warunek zajścia rezonansu mechanicznego został spełniony.

Parametr: $n = 5.0$

Wyniki symulacji dla parametru $n = 5.0$ przedstawiono na rysunkach 14 oraz 15.



Rysunek 14: Wykres wychyleń $u(x,t)$ atomów z położenia równowagi dla $n = 5.0$.



Rysunek 15: Wykres energii kinetycznej, potencjalnej i całkowitej układu łańcucha atomów dla $n = 5.0$.

Na wykresie 14 zauważamy, iż fala obrazująca wychylenie z położenia równowagi stopniowo rozchodzi się w łańcuchu atomów. Amplituda wychyleń atomów z położenia równowagi nieustannie rośnie, a samym rozwiązaniem fali jest pięć fali stojących, które stają się zauważalne dopiero po osiągnięciu przez układ pewnej energii. Warunek rezonansowy został spełniony.

Na rysunku 15 zaznaczono energię kinetyczną, potencjalną i całkowitą układu. Zauważamy iż energia układu nieustannie rośnie. Zatem warunek zajścia rezonansu mechanicznego został spełniony.

6 Podsumowanie

w trakcie sporządzania projektu zapoznano się z modelem dynamiki jednowymiarowego łańcucha atomów. Korzystając z formalizmu Lagrange'a zapisano równanie ruchu dla i -tego atomu takiego łańcucha.

Rozważono szczególne rozwiązanie ze względu na warunki brzegowe opisujące falę stojącą. Wyprowadzono wzór na częstość własną układu łańcucha atomów.

Dokonano implementacji ewolucji czasowej dla układu atomów w łańcuchu dla metody RK4. Dokonano symulacji za pomocą własnego programu komputerowego.

Wygenerowano wykresy obrazujące wychylenie $u(x,t)$ atomu z położenia równowagi w funkcji czasu oraz wykresy energii kinetycznej, potencjalnej i całkowitej układu dla rozchodzącego się w łańcuchu zaburzenia. Dokonano analizy wyników.

Wygenerowano wykresy obrazujące wychylenie $u(x,t)$ atomu z położenia równowagi w funkcji czasu oraz wykresy energii kinetycznej, potencjalnej i całkowitej układu dla zewnętrznej siły wymuszającej o zadanej, poprzez parametr n , częstotliwości. Dokonano analizy otrzymanych wyników. Sprawdzono warunek zajścia rezonansu mechanicznego.

Reasumując, wykonano wszystkie zapisane w instrukcji zadania i zdobyto umiejętności pozwalające na ich wykonanie.

7 Źródła

1. Instrukcja do zajęć laboratoryjnych "Projekt 4: dynamika jednowymiarowego łańcucha atomów" dr hab inż. Tomasz Chwiej
2. Instrukcja "Implementacja metody RK4." dr hab inż. Tomasz Chwiej