

 AGH	Akademia Górniczo-Hutnicza Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej Fizyka Techniczna Podstawy fizyki teoretycznej	Zrealizował: Ryś Przemysław
Rok akademicki: 2022/2023	Semestr VI	Grupa laboratoryjna nr 2
Temat projektu: Projekt 4: Dynamika jednowymiarowego łańcucha atomów		
Data wykonania projektu 09.06.2023	Data oddania sprawozdania 09.06.2023	Ocena

1 Metoda obliczeniowa

Metodą zaimplementowaną w celu wykonania projektu była metoda Rungego-Kutta 4 rzędu skrótnie nazywana RK4. Pozwala ona rozwiązywać równania jak i układy równań różniczkowych 1 rzędu poprzez kroki czasowe popełniając przy tym niewielki błąd, na które to zawsze podatne są wyniki naszych rachunków w przypadku prowadzenia obliczeń numerycznych. W każdym kroku używa się wartości pochodnej funkcji, aby oszacować wartość funkcji w kolejnym punkcie. Metoda umożliwia również możliwość obliczenia równań różniczkowych wyższych rzędów, w zamian za dodatkowe równanie, które będzie przypisaniem do nowej zmiennej pochodnej szukanej funkcji. W wyniku takiego jednokrotnego przypisania schodzimy rzędem równania różniczkowego o jeden. Postępując tak kilkukrotnie możemy sprowadzić równanie różniczkowe rzędu n do układu n równań różniczkowych pierwszego rzędu.

Rozwiązanie w $i + 1$ kroku algorytmu ma postać:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{\Delta t}{6}(k_1 + 2 \cdot k_2 + 2 \cdot k_3 + k_4) \quad (1)$$

, gdzie: y_i jest rozwiązaniem w kroku poprzednim, Δt jest krokiem czasowym symulacji, natomiast współczynniki k_α definiowane na potrzeby metody mają postać:

$$k_1 = f(t_i, y_i) \quad (2)$$

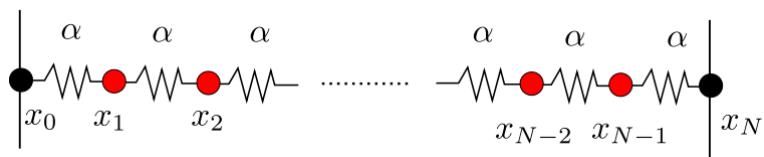
$$k_2 = f\left(t_i + \frac{\Delta t}{2}, y_i + \frac{\Delta t}{2} \cdot k_1\right) \quad (3)$$

$$k_3 = f\left(t_i + \frac{\Delta t}{2}, y_i + \frac{\Delta t}{2} \cdot k_2\right) \quad (4)$$

$$k_4 = f(t_i + \Delta t, y_i + \Delta t \cdot k_3) \quad (5)$$

2 Wstęp teoretyczny

Postawionym zadaniem jest wykonać obliczenia numeryczne dla łańcucha atomów.



Rys. 1: Układ atomów w łańcuchu

W stanie spoczynku atomy znajdują się w położeniach zadanych według przepisu $x_{i,0} = \Delta \cdot i$, $i = 0, 1, \dots, N$, gdzie Δ to równowagowa odległość międzyatomowa. W modelu zakładamy, iż istnieją oddziaływanie atomu jedynie między nim a jego sąsiadami. Energia oddziaływanie atomów o indeksach i oraz j wynosi

$$U_{i,j} = \frac{\alpha}{2} [(x_i - \Delta \cdot i) - (x_j - \Delta \cdot j)]^2, \quad (6)$$

gdzie $x_i - \Delta \cdot i$ oraz $x_j - \Delta \cdot j$ stanowią wychylenia z położenia równowagi. Traktując każdy atom z osobna, można znaleźć energię kinetyczną i potencjalną układu, a tym samym Lagranżjan sumując wkłady od każdego z nich.

$$L = T - U = \sum_{i=0}^N T_i - \sum_{i=1}^N U_{i-1,i} \quad , \text{ gdzie: } T_i = \frac{m}{2} \dot{x}_i^2, \quad U_i = \frac{\alpha}{2} (x_{i-1} - x_i + \Delta)^2. \quad (7)$$

Następnie korzystając z równania Eulera-Lagrange'a można znaleźć równanie ruchu i-tej cząstki w układzie. Równań takich zatem będzie tyle, ile w układzie znajduje się atomów.

Mody własne układu

Ponieważ położenia atomów na obu końcach łańcucha są ustalone, jednym z dopuszczalnych rozwiązań opisujących ruch atomów będzie fala stojąca, znaczy to, że wszystkie atomy będą drgać z jednakową częstotliwością własną. W związku z powyższym rozwiązanie dla i-tego atomu ma postać

$$x_i(t) = x_{i,0} + A_i \sin(kx_i) \cos(\omega t), \quad (8)$$

gdzie: $x_{i,0}$ - położenie spoczynkowe, A_i - amplituda drgań, k - liczba falowa, ω - częstotliwość drgań. Po podstawieniu zależności 8 do równania 7 i skorzystaniu z odpowiednich zależności trygonometrycznych otrzymujemy:

$$\omega^2 = \frac{2\alpha}{m} (1 - \cos(k\Delta)) = \frac{4\alpha}{m} \sin^2\left(\frac{k\Delta}{2}\right) \quad (9)$$

Z warunku brzegowego $k_{xmax} = n\pi$, $n = 0, 1, 2, \dots$ dla $x_{max} = \Delta \cdot N$ dostajemy relację opisującą liczbę falową modów własnych:

$$k_n = \frac{n\pi}{N\Delta} \quad (10)$$

oraz dyskretnie częstotliwości drgań [relację dyspersji $\omega(k)$]:

$$\omega_n = 2\sqrt{\frac{\alpha}{m}} \sin\left(\frac{n\pi}{2N}\right) \quad (11)$$

3 Wyniki symulacji

Parametry wykorzystane do przeprowadzenia symulacji drgań łańcucha atomów:

- $N = 51$ - liczba zmiennych niezależnych (jeden dodatkowy atom w $x = 0$),
- $\Delta t = 0.02$ - krok czasowy,
- $\Delta = 0.1$ - równowagowa odległość międzyatomowa,
- $\alpha = 1$ - stała sprężystości,
- $m = 1$ - masa pojedynczego atomu.
- $n_t = 5000$ - liczba kroków czasowych

Początkowy rozkład położień atomów:

$$s_i = x_{i,0} + \frac{\Delta}{3} \exp\left(-\frac{(x_{i,0} - 0.5x_{max})^2}{2\sigma^2}\right), \quad i = 0, 1, \dots, N \quad (12)$$

Jako warunek początkowy przyjmujemy również, że atomy nie mają prędkości początkowej

$$\dot{s}_{N+1+i} = 0, \quad i = 0, 1, \dots, N \quad (13)$$

Procedura iteracyjna pochodnych ma postać:

$$\dot{s}_i = s_{N+1+i}, \quad i = 1, 2, \dots, N-1 \quad (14)$$

$$\dot{s}_{N+1+i} = \frac{\alpha}{m}(s_{i-1} - 2s_i + s_{i+1}), \quad i = 1, 2, \dots, N-1 \quad (15)$$

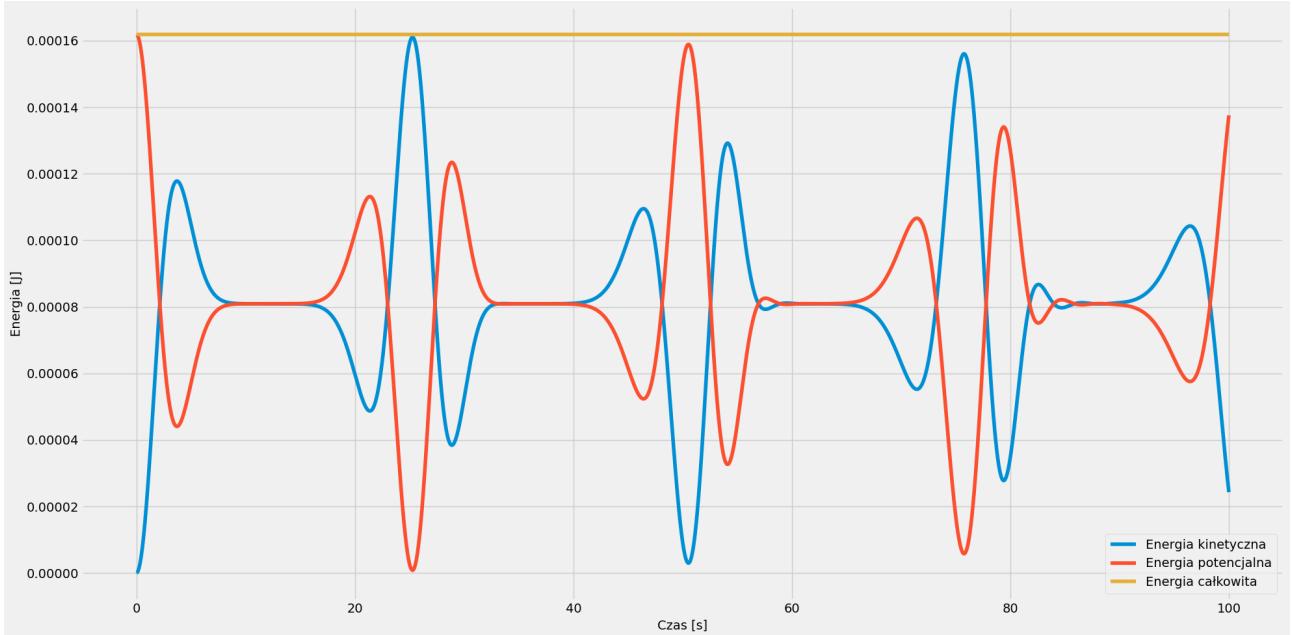
Zastosowane warunki brzegowe w symulacji to (prędkości i przyspieszenia w punktach zaczepienia łańcucha są równe 0):

$$\dot{s}_0 = 0 \quad (16)$$

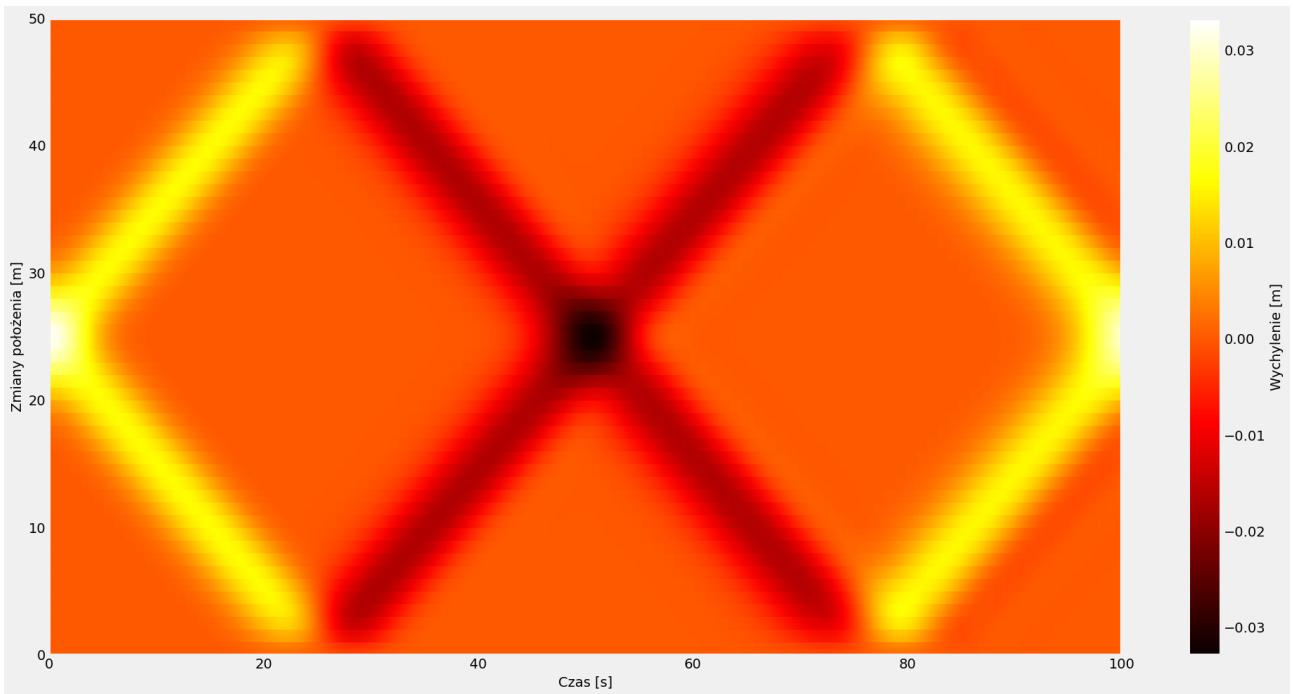
$$\dot{s}_N = 0 \quad (17)$$

$$\dot{s}_{N+1} = 0 \quad (18)$$

$$\dot{s}_{2N+1} = 0 \quad (19)$$



Rys. 2: Wartości energii kinetycznej, potencjalnej oraz całkowej w zależności od czasu dla przypadku warunków początkowych zadanych wzorami 12, 13 oraz brzegowych 16, 17, 18, 19



Rys. 3: Mapa zmian położenia atomów w czasie symulacji dla przypadku warunków początkowych zadanych wzorami 12, 13 oraz brzegowych 16, 17, 18, 19

Rezonans mechaniczny

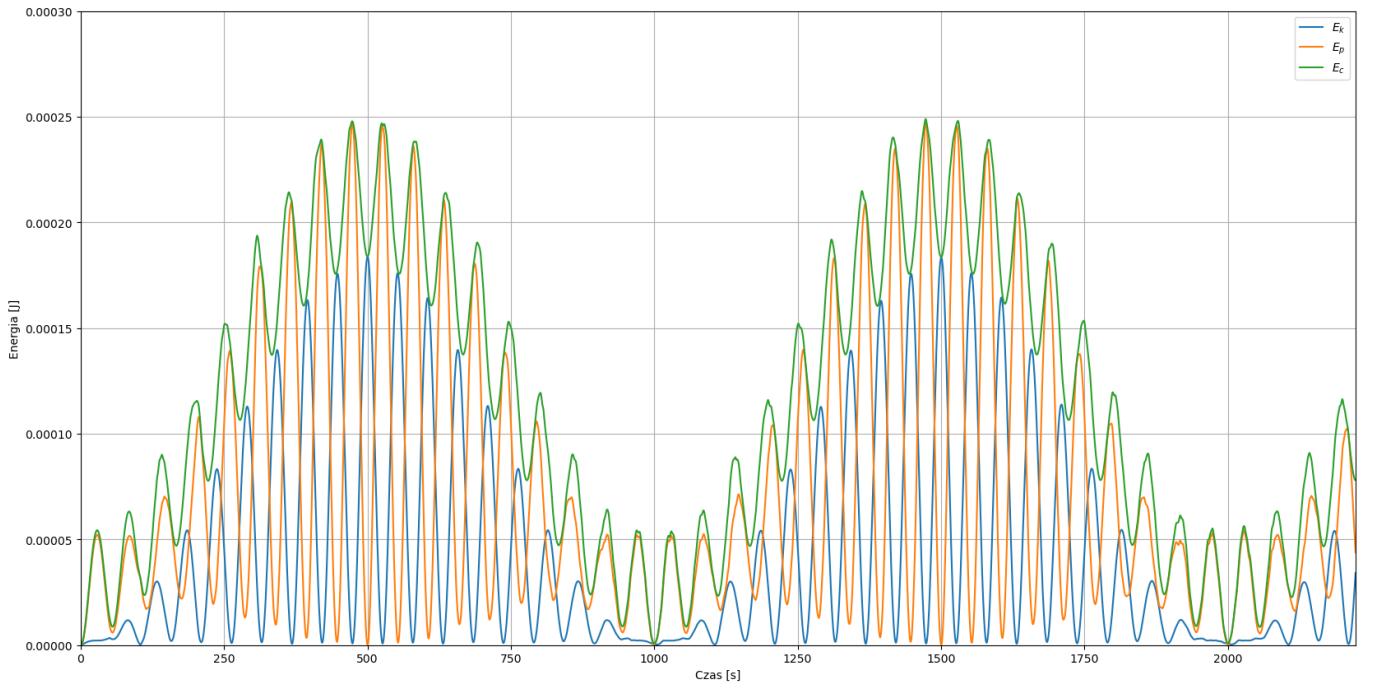
Jako warunek początkowy przyjęliśmy, że atomy spoczywają w położeniach równowagi oraz, że nie mają one prędkości początkowej:

$$s_i = x_{i,0}, \quad i = 0, 1, \dots, N \quad (20)$$

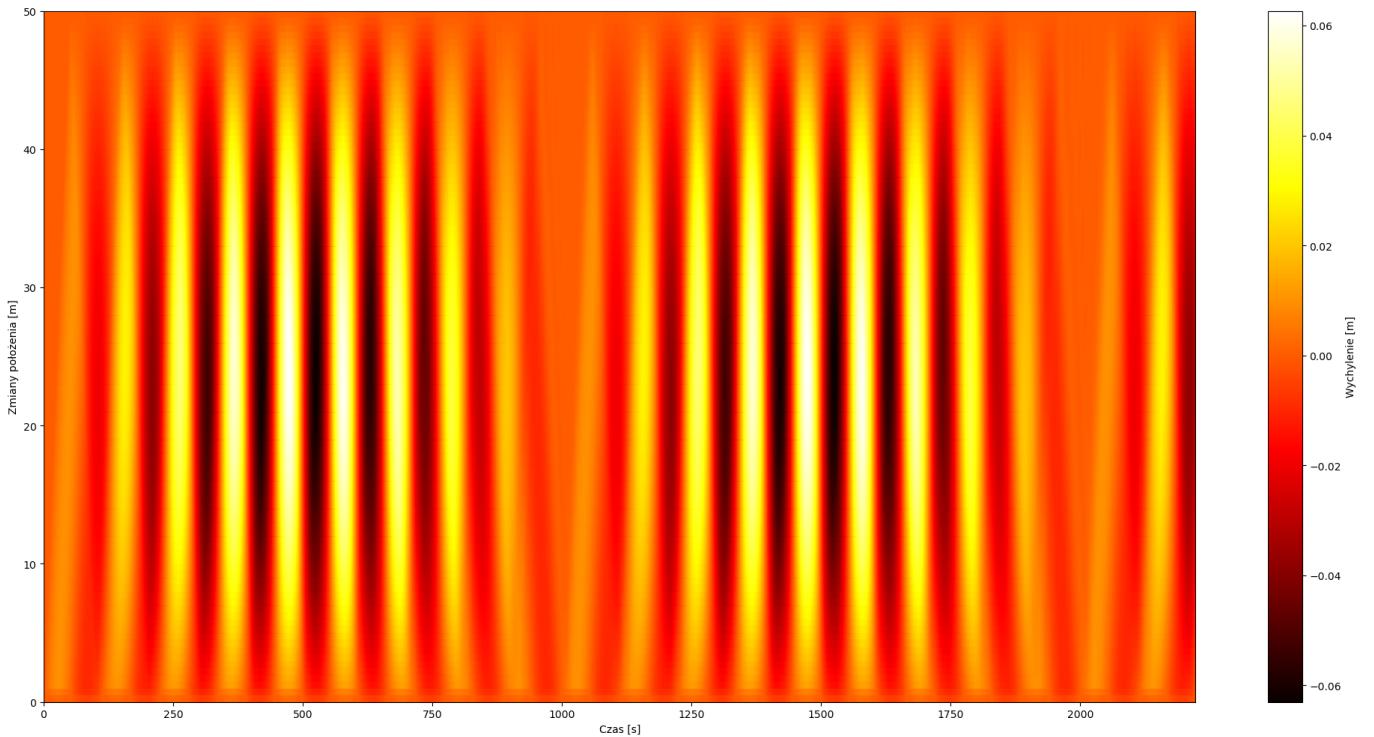
$$\dot{s}_{N+1+i} = 0, \quad i = 0, 1, \dots, N \quad (21)$$

Następnie korzystając z relacji dyspersji 11 określamy siłę wymuszającą, czas symulacji ustalamy na $t_{max} = 20 \cdot \frac{2\pi}{\omega_n}$, a liczbę kroków czasowych na $n_t = (\text{int})(\frac{t_{max}}{\Delta t})$. Siłą tą działamy na atom o numerze $m = 1$, czyli modyfikujemy jego pochodną w procedurze do postaci:

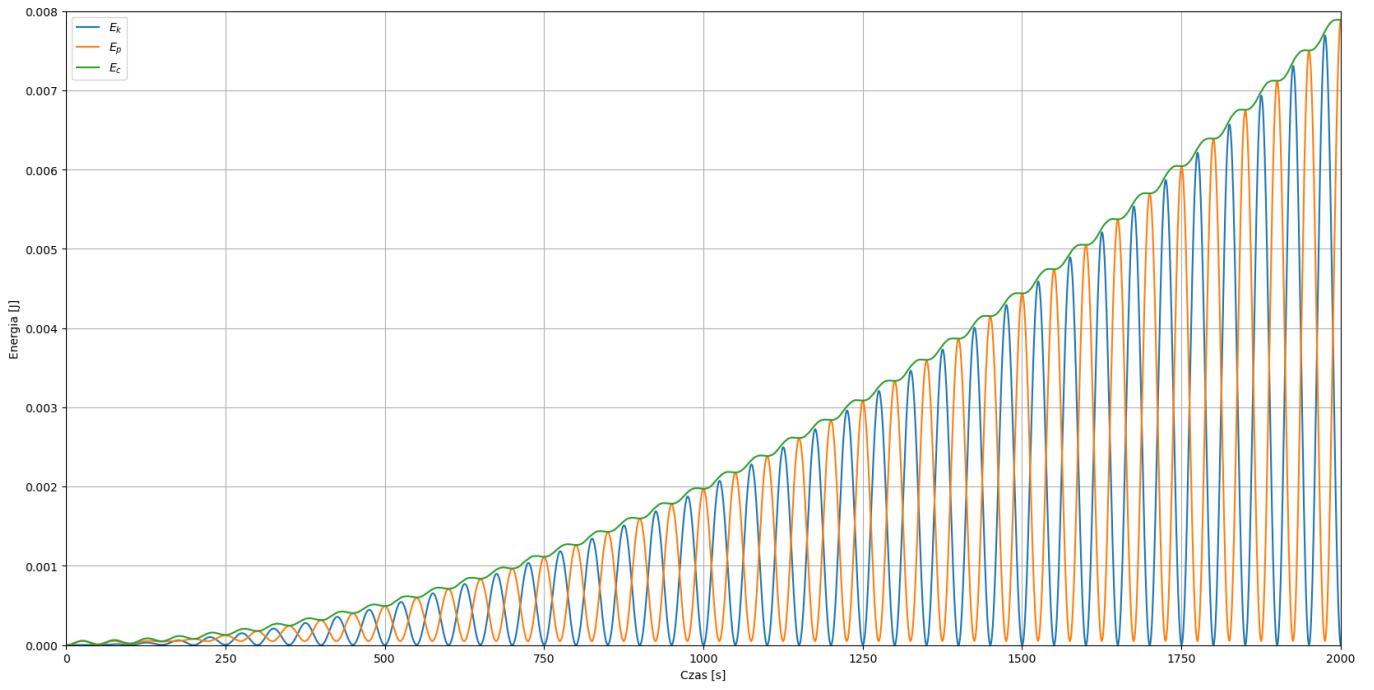
$$\dot{s}_m = \frac{\alpha}{m}(s_{m-1} - 2s_m + s_{m+1}) + \frac{F}{m} \sin(\omega_n t) \quad \text{gdzie } F = 0.01 \text{ to amplituda wymuszenia.} \quad (22)$$



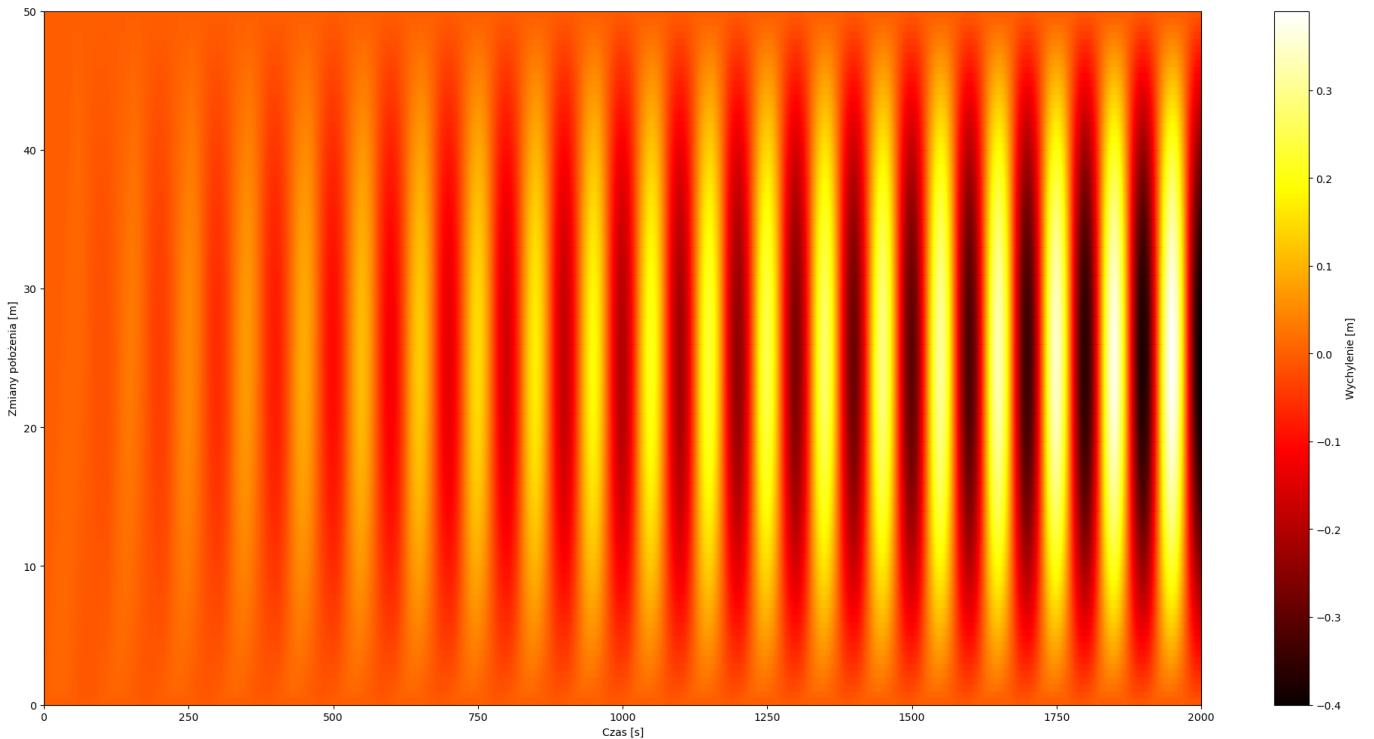
Rys. 4: Wartości energii kinetycznej, potencjalnej oraz całkowitej w zależności od czasu dla przypadku wymuszenia zadanego siłą $F = 0.01$ działającą na $m = 1$ atom, gdzie $n = 0.9$ z warunkami początkowymi zadanymi wzorami 20, 21 oraz brzegowymi 16, 17, 18, 19



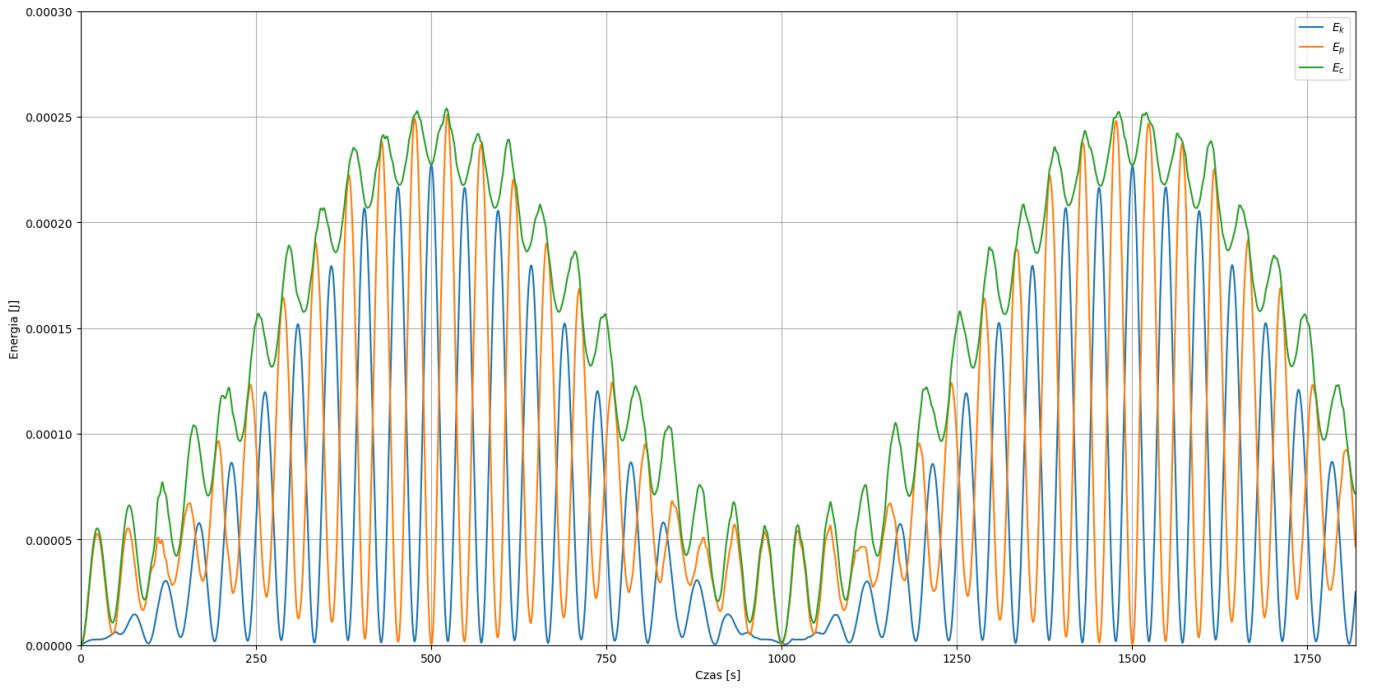
Rys. 5: Mapa zmian położen atomów w czasie symulacji dla $n = 0.9$ z warunkami początkowymi zadanymi wzorami 20, 21 oraz brzegowych 16, 17, 18, 19



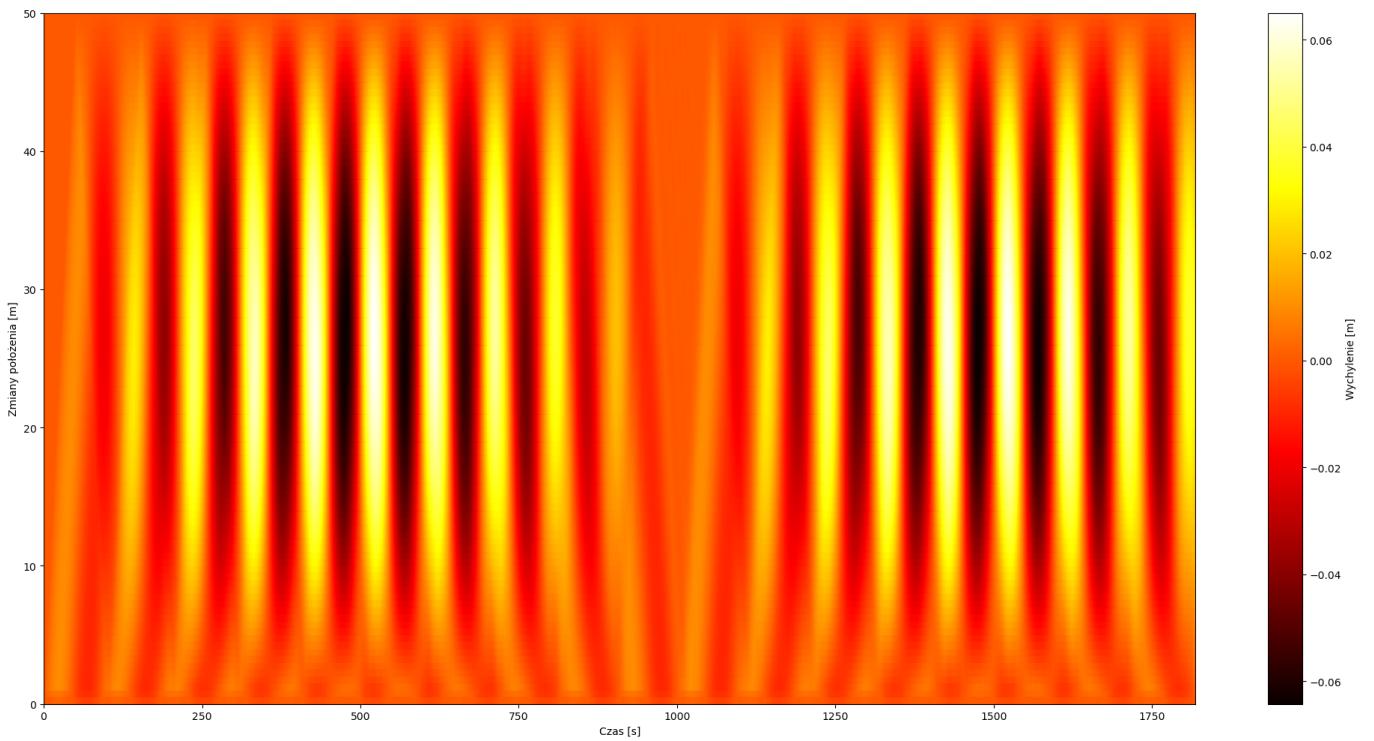
Rys. 6: Wartości energii kinetycznej, potencjalnej oraz całkowitej w zależności od czasu dla przypadku wymuszenia zadanego siłą $F = 0.01$ działającą na $m = 1$ atom, gdzie $n = 1.0$ z warunkami początkowymi zadanymi wzorami 20, 21 oraz brzegowymi 16, 17, 18, 19



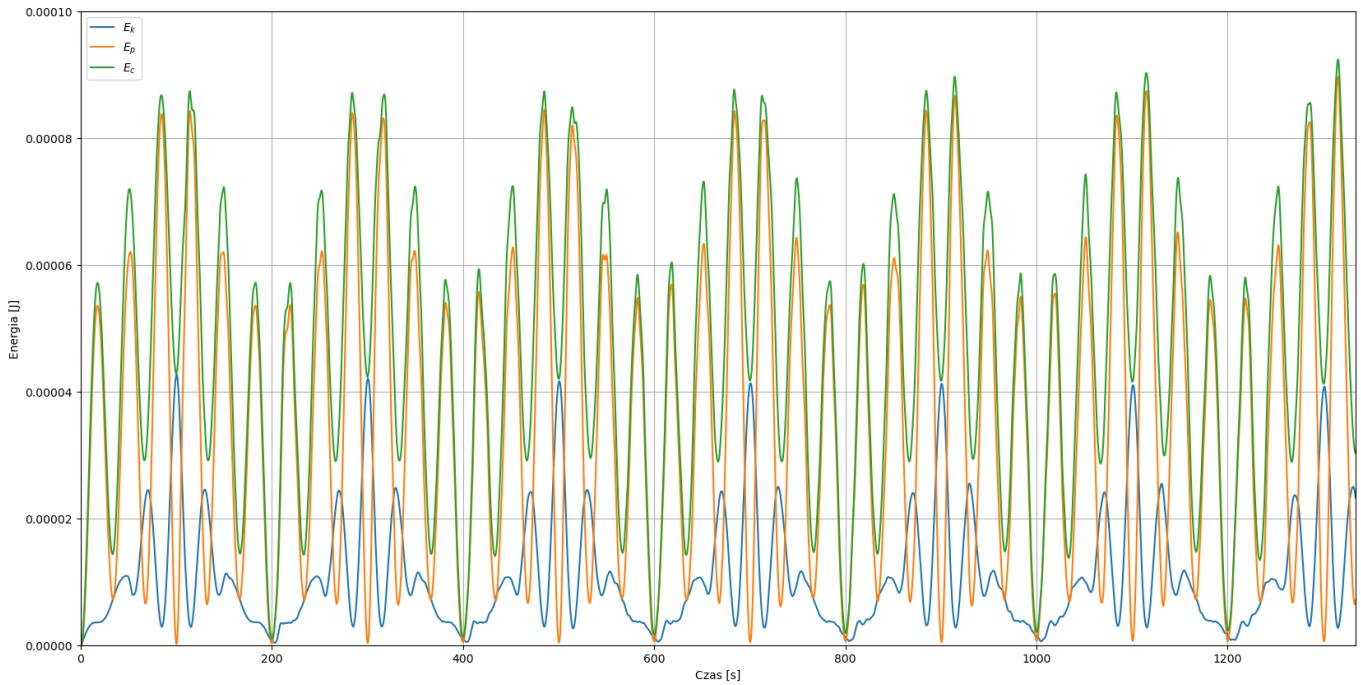
Rys. 7: Mapa zmian położenia atomów w czasie symulacji dla $n = 1.0$ z warunkami początkowymi zadanymi wzorami 20, 21 oraz brzegowych 16, 17, 18, 19



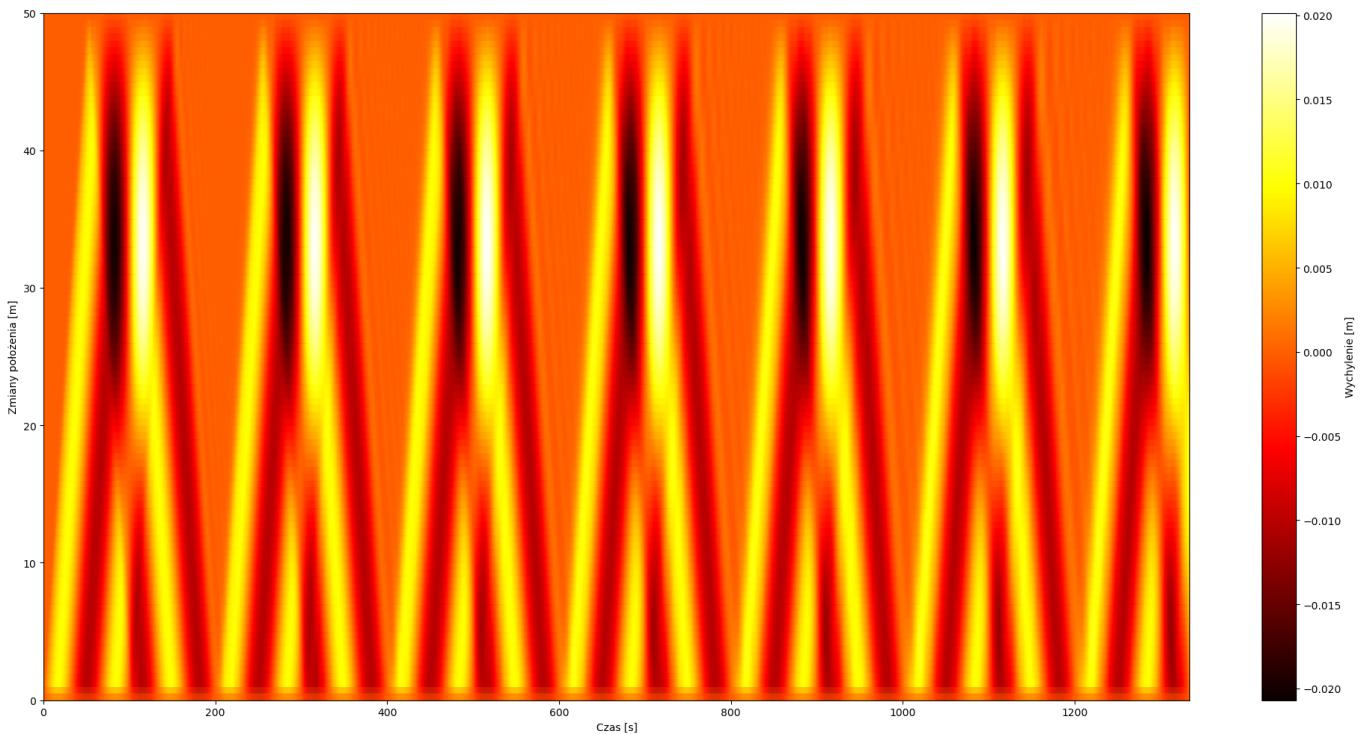
Rys. 8: Wartości energii kinetycznej, potencjalnej oraz całkowitej w zależności od czasu dla przypadku wymuszenia zadaneego siłą $F = 0.01$ działającą na $m = 1$ atom, gdzie $n = 1.1$ z warunkami początkowymi zadanymi wzorami 20, 21 oraz brzegowymi 16, 17, 18, 19



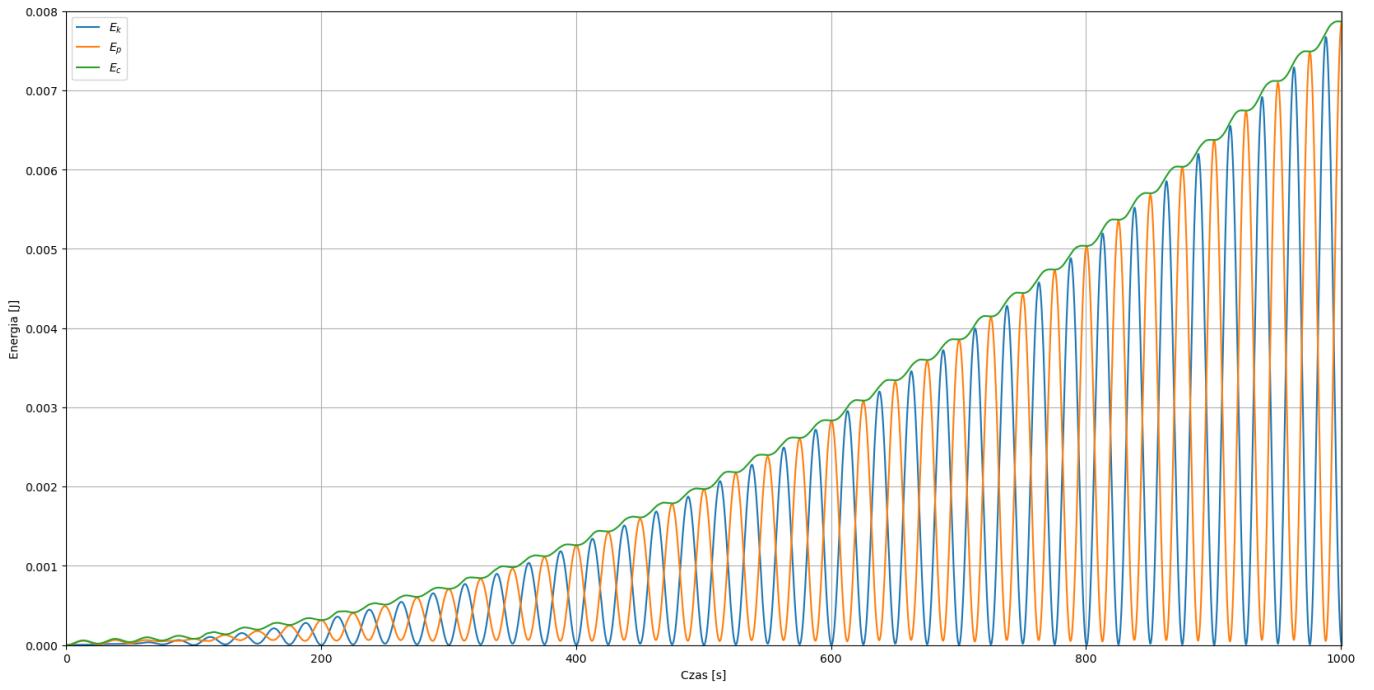
Rys. 9: Mapa zmian położenia atomów w czasie symulacji dla $n = 1.1$ z warunkami początkowymi zadanymi wzorami 20, 21 oraz brzegowych 16, 17, 18, 19



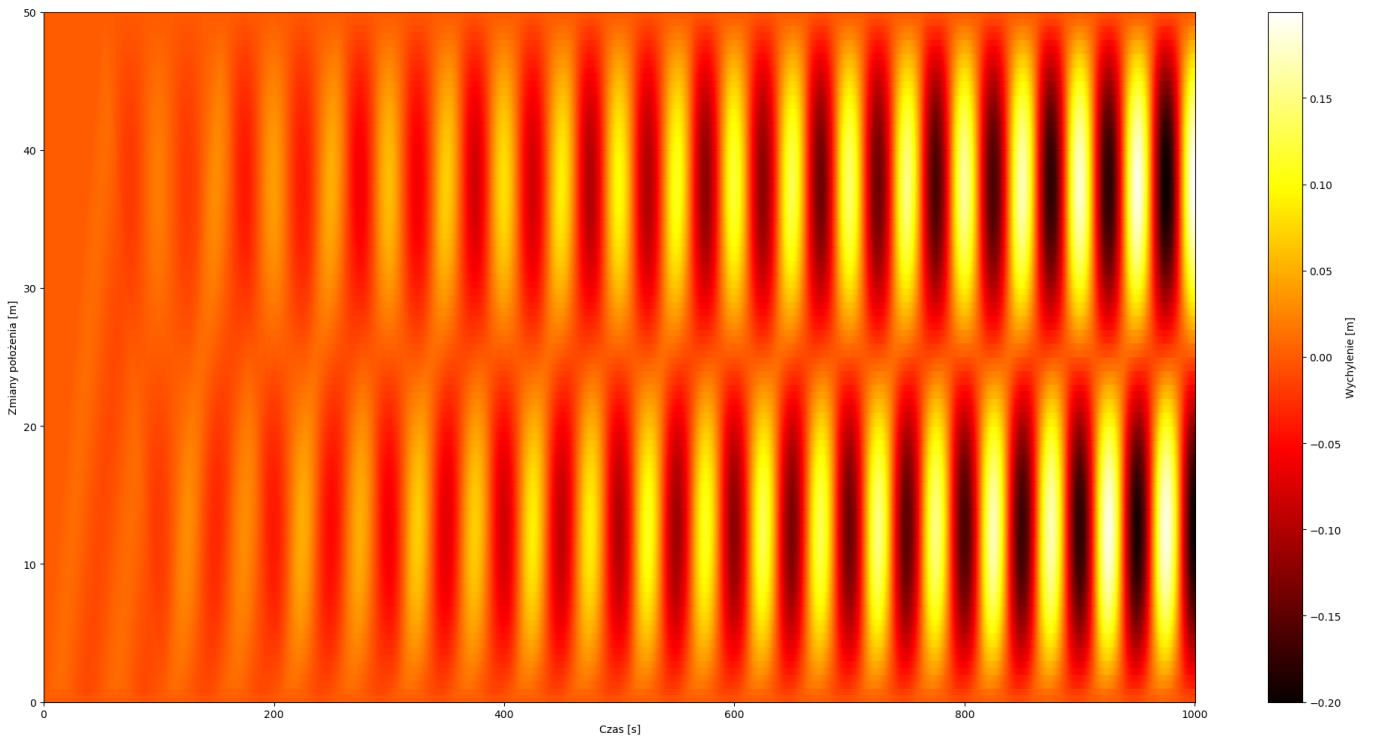
Rys. 10: Wartości energii kinetycznej, potencjalnej oraz całkowitej w zależności od czasu dla przypadku wymuszenia zadaneego siłą $F = 0.01$ działającą na $m = 1$ atom, gdzie $n = 1.5$ z warunkami początkowymi zadanymi wzorami 20, 21 oraz brzegowymi 16, 17, 18, 19



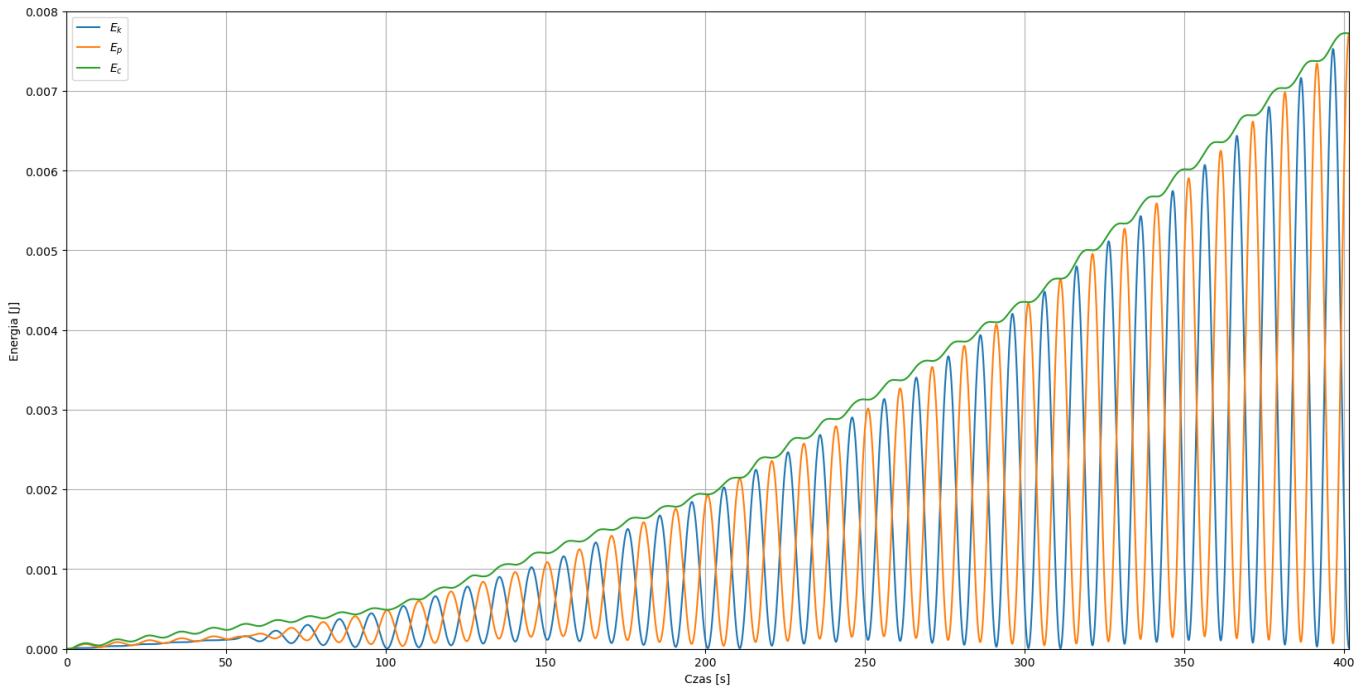
Rys. 11: Mapa zmian położen atomów w czasie symulacji dla $n = 1.5$ z warunkami początkowymi zadanymi wzorami 20, 21 oraz brzegowych 16, 17, 18, 19



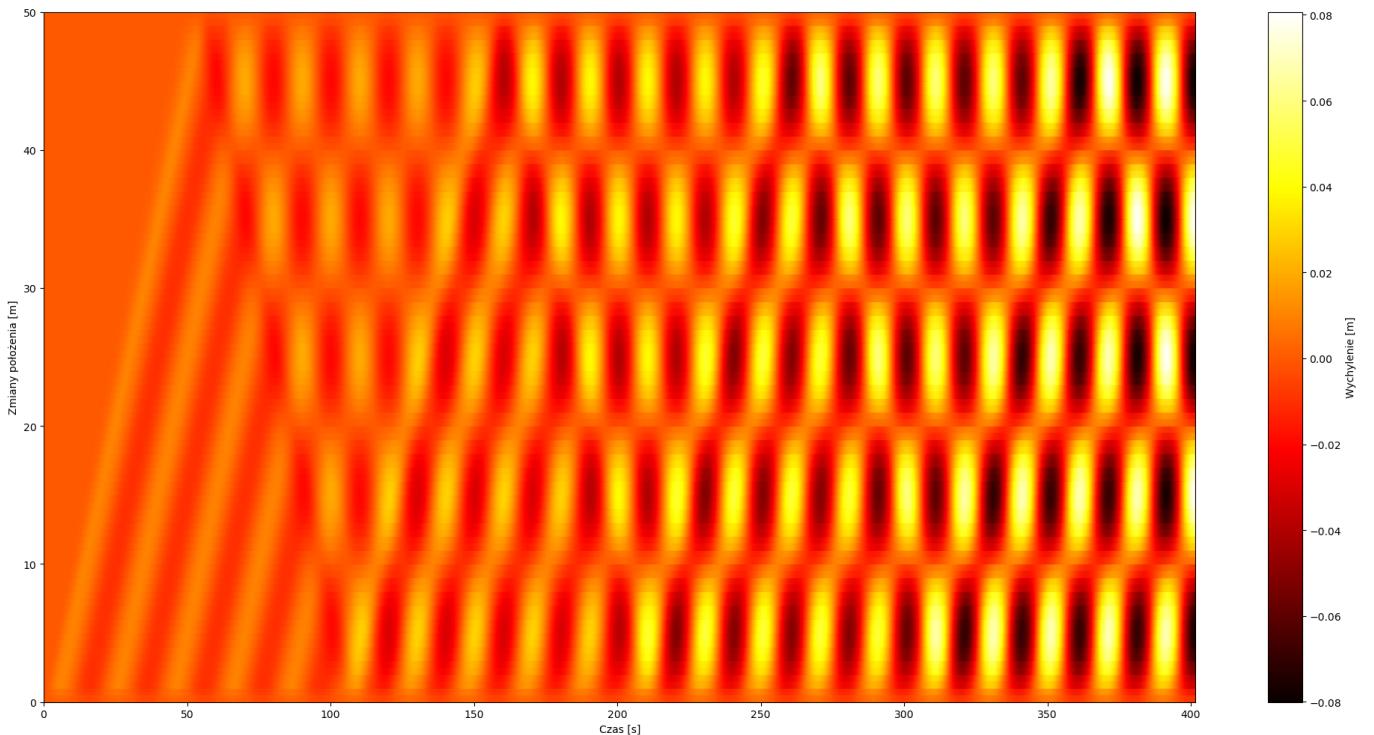
Rys. 12: Wartości energii kinetycznej, potencjalnej oraz całkowitej w zależności od czasu dla przypadku wymuszenia zadanego siłą $F = 0.01$ działającą na $m = 1$ atom, gdzie $n = 2.0$ z warunkami początkowymi zadanymi wzorami 20, 21 oraz brzegowymi 16, 17, 18, 19



Rys. 13: Mapa zmian położenia atomów w czasie symulacji dla $n = 2.0$ z warunkami początkowymi zadanymi wzorami 20, 21 oraz brzegowych 16, 17, 18, 19



Rys. 14: Wartości energii kinetycznej, potencjalnej oraz całkowitej w zależności od czasu dla przypadku wymuszenia zadanego siłą $F = 0.01$ działającą na $m = 1$ atom, gdzie $n = 5.0$ z warunkami początkowymi zadanymi wzorami 20, 21 oraz brzegowymi 16, 17, 18, 19



Rys. 15: Mapa zmian położenia atomów w czasie symulacji dla $n = 5.0$ z warunkami początkowymi zadanymi wzorami 20, 21 oraz brzegowych 16, 17, 18, 19

4 Wnioski

Analizując wyniki symulacji łańcucha atomów, zauważamy, że dla przypadku początkowego rozkładu atomów zadanego gaussianem (wzór 12) i bez działającej siły wymuszającej całkowita energia układu zostaje zachowana, natomiast wartości jej form składowych (kinetyczna i potencjalna) oscylują między sobą, gdzie w czasie ich amplitudy zaczynają się wygaszać względem równowagowej wartości wynoszącej $E = 0.00008$ [J], co świadczy o tym, iż układ dąży do stanu równowagi. Z mapy wychyleń wywnioskować można, że z początkowego położenia będącego gaussianem, zaburzenie rozpływające się w dwie przeciwwstawne strony, po czym w około 25 sekundzie dochodzi do brzegu, gdzie w wyniku sztywnych warunków brzegowych odwraca się polaryzacja zaburzenia. Tak też układ dalej działa w czasie. Przyglądając się chwili $t = 0$ oraz $t = 100$, gdzie owe zaburzenie skupia się w tym samym punkcie o tej samej polaryzacji zauważać możemy lekką różnicę, jaką to stanowi małe rozmycie wychyleń. Jest to logiczne następstwo zauważonej wcześniej własności wykresu energii 3, gdyż jeśli układ działałby wystarczająco długo, to wychylenia atomów będą utrzymywać się w określonym zakresie wokół danego punktu. Wraz z ustabilizowaniem się wychyleń, energia kinetyczna układu będzie zmierzać do zera, ponieważ prędkości atomów będą maleć. Z drugiej strony, energia potencjalna będzie definiować końcowe położenie równowagi.

W kontekście wyników uzyskanych w przypadku działającej siły, zauważać można, że dla n , które nie jest całkowite, tj. dla rysunków 4, 8, 10, energia układu oscyluje, zwiększając się do pewnego momentu, by następnie zmaleć. Spowodowane jest to tym, iż siła nie jest przykładana zgodnie z częstotliwościami własnymi układu, w wyniku czego raz działa ona na układ tak, że pomaga mu osiągnąć większą energię, a raz tak, że mu tę energię odbiera, działając przeciwnie do oscylacji. W przypadku n całkowitych, tj. dla rysunków 6, 12, 14, siła przykładana jest w modach układu, tak, że jest ona skierowana w sposób preferencyjny do drgań atomów. Spełniony jest zatem warunek rezonansowy, w wyniku czego amplituda układu nieustannie rośnie w miarę upływu czasu.