Модель системи зв'язаних осциляторів

При зв'язуванні гармонічних осциляторів (частинок, які рухаються за законом Гука) між собою їх рух вже не буде описуватися гармонічними коливаннями. Так само коливання атомів у кристалі неможливо описати одним синусоїдальним (гармонічним) законом. Причина в тому, що коливання зв'язаних частинок визначається зміщеннями не лише самого атома, а й його сусідів. Найпростішою моделлю для дослідження зв'язаних коливань є модель системи зв'язаних осциляторів (модель ланцюжка).

При досить великій кількості частинок у ланцюжку рух повздовжньої хвилі можна моделювати розв'язуючи чисельно рівняння руху Ньютона для окремих частинок. Енергія передається вздовж ланцюжка, хоч кожен з осциляторів залишається поблизу свого рівноважного положення. Загальний рух системи можна представити як суперпозицію *N* незалежних простих гармонічних коливань.

Постановка задачі. Ланцюжок з N частинок, кожна масою т, з рівноважною відстанню між сусідніми I. Частинки зв'язані пружинками нульової маси з коефіцієнтом пружності k, дві крайні пружинки мають коефіцієнт пружності k_a . Кінці лівої та правої пружинок нерухомі.

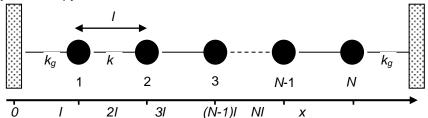


Рис. Модель ланцюжка на пружинках з нерухомо закріпленими кінцями

Положення кожної частинки можна визначати за формулами Ейлера, але вираз для визначення сили, що діє на кожну частинку ускладниться. Розглянемо *і*-ту частинку та визначимо силу у наближенні найближчого впливу, тобто з урахуванням дії лише сусідніх з частинкою пружинок:

$$F_{i} = F_{i}^{left} + F_{i}^{rigth} = -\left|F_{i}^{left}\right| + \left|F_{i}^{rigth}\right| = K_{i,i-1} \cdot \Delta X_{i,i-1} - K_{i,i-1} \cdot \Delta X_{i,i-1}$$

Оскільки
$$\Delta \mathbf{X}_{i,j} = \mathbf{I} - \left(\mathbf{X}_j - \mathbf{X}_i\right), \ \mathbf{X}_i < \mathbf{X}_j, \ \text{то} \ \mathbf{F}_i = \mathbf{k}_{i,i-1} \cdot \left(\mathbf{I} - \mathbf{X}_i + \mathbf{X}_{i-1}\right) - \mathbf{k}_{i,i+1} \cdot \left(\mathbf{I} - \mathbf{X}_{i+1} + \mathbf{X}_i\right).$$

Якщо покласти, що початок відліку співпадає з лівою стінкою, то рівноважні положення кульок визначатимуться як $\mathbf{x}_i(0) = i \cdot I$. Тоді формулу для визначення сили можна спростити:

$$F_{i} = \begin{cases} k_{g} \cdot (I - X_{1}) - k \cdot (I - X_{2} + X_{1}), & i = 1 \\ -k \cdot (2X_{i} - X_{i+1} - X_{i-1}), & i = \overline{2, N-1} \\ k \cdot (I - X_{N} + X_{N-1}) - k_{g} \cdot (X_{N} - NI), & i = N \end{cases}$$

Далі для кожної з частинок на кожному кроці по часу необхідно використати молекулярно-динамічну схему. Для опису координат, швидкостей та сил доцільно використати масиви. Як і в задачі про гармонічний осцилятор, систему необхідно вивести з рівноваги, щоб повна енергія системи не дорівнювала нулю. Для цього можна задати початкові зміщення та швидкості кожній з кульок. Ми для прикладу зміщуємо лише одну з кульок на величину Δx (для означеності першу).

Тестовий приклад.

$$m = 1$$
, $k = 10$, $k_{a} = 2$, $x_{i}(0) = i \cdot l$, $v_{i}(0) = 0$, $i = \overline{1,N}$, $\Delta x = 0.5$, $\Delta t = 0.01$, $t_{ai} = 10$.

Завдання.

- 1. Виводити положення кульок у кожен момент часу.
- 2. Визначити повну енергію системи.
- 3. Розглянути систему зі слабко зв'язаними пружинками $k_g > k$ ($k_g = 1$, k = 0.2). Отримати часову залежність першої частинки. Чи можна розпізнати два види коливань, накладених одне на одне. Чому дорівнює період коливань амплітуди.
- 4. Як якісно зміниться частота коливань при k = 0.1.

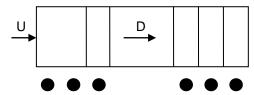


Рис. Взаємнооднозначна відповідність кульок ланцюжка кристалічним прошаркам, що перпендикулярні напряму навантаження U

Описану модель можна застосувати не тільки для перевірки законів механіки, а й для імітації реальних процесів, що відбуваються на нанорівні у твердих тілах. Наприклад, у фізиці ударних хвиль використовується рівняння стану, яка визначає залежність швидкості поширення збурення у середовищі від швидкості самого збурення. Зокрема, для твердих тіл експериментально доведено, що швидкість ударної хвилі (що поширюється у тілі) прямо пропорційно залежить від масової швидкості (з якою здійснюється навантаження або удар). Якщо вважати, що кожна кулька у

нашій моделі відповідає прошарку деякої товщини металу, розміщеного перпендикулярно до напрямку удару, то можна дослідити залежність швидкості перенесення імпульсу D, наданого першій кульці, від швидкості удару U. На відміну від алгоритму AI_2_1: 1) початкові швидкості і координати кульок, крім швидкості першої ($\upsilon_1 := U$), задаємо нульовими; 2) в ітераційній процедурі швидкості першої та останньої кульок і координату останньої кульки не перераховуємо, координата першої кульки залежить від постійної швидкості U; 3) цикл по часу повторюємо, поки швидкість останньої кульки нульова (поки імпульсу не переданий останній кульці) – алгоритм AI_2_2.

