Этап 4

Результаты проекта

Канева Екатерина

Клюкин Михаил

Ланцова Яна

Содержание

# 1 Введение

**Актуальность**

Все вещества состоят из атомов, которые постоянно колеблются. Изучение этих колебаний помогает нам понять, как материалы ведут себя при разных температурах. Особенно важно понимать, как колебания приводят к тепловому равновесию. Исследование цепочек атомов, связанных пружинками, это простая модель, чтобы понять, как возникают колебания в кристаллах. Эта модель помогает объяснить, почему некоторые классические законы физики работают только при высоких температурах. Понимание колебаний важно для создания новых материалов с нужными свойствами, например, для электроники или термоизоляции.

**Цель работы**

Исследовать закономерности колебаний в простейшей одномерной цепочке атомов, связанных между собой.

**Объект и предмет исследования**

1. Изучение условий для установления равновесия
2. Изучение условий для приближения к равновесию
3. Изучение явлений в простейшем одномерном случае

**Задачи**

1. Построить модель цепочки из N частиц.
2. Описать алгоритм для моделирования гармонических и ангармонических колебаний.
3. Реализовать программу для моделирования гармонических и ангармонических колебаний.

**Материалы и методы**

Язык программирования Julia

* Plots.jl
* LinearAlgebra
* FFTW

# 2 Теоретическое описание задачи

## 2.1 Гармоническая цепочка

Если начально пружины не деформированы, то положение равновесия i-й частицы — это . Вводятся малые смещения от положения равновесия (считаем, что много меньше ). Тогда силы, действующие на -ю частицу, записываются как:

Соответственно, уравнение движения имеет вид:

### 2.1.1 Полная энергия системы

Полная энергия системы учитывает как кинетическую, так и потенциальную энергию:

### 2.1.2 Решение уравнения

Физически обоснованным решением является форма стоячей волны:

Граничные условия и приводят к ограничению на :

Это выполняется при значениях:

## 2.2 Ангармоническая цепочка

Для реальных пружин линейное выражение для возвращающей силы верно только для малых деформаций. При больших сжатиях пружины сила обычно больше, а при больших растяжениях меньше, чем . Такую зависимость можно получить, добавив еще одно слагаемое к силе:

Здесь — безразмерный коэффициент. В этом случае выражение для энергии будет выглядеть так:

# 3 Программная реализация

using Plots  
using LinearAlgebra  
using FFTW  
using Dates  
  
# Гармонические колебания  
function harmonic\_chain\_simulation(;  
 N=20, # Количество частиц  
 m=1.0, # Масса частицы  
 k=1.0, # Жёсткость пружины  
 alpha=0.0, # Коэффициент ангармоничности (0 для гармонического случая)  
 T=100.0, # Общее время моделирования  
 dt=0.01, # Шаг по времени  
 dd=1.0, # Расстояние между частицами  
 initial\_displacement=0.1, # Амплитуда начального возмущения  
 save\_every=10 # Сохранять состояние каждые save\_every шагов  
)  
 # Инициализация массивов (включая граничные условия)  
 y = zeros(N+2) # Смещения (y[1] и y[N+2] - граничные условия)  
 v = zeros(N+2) # Скорости  
 a = zeros(N+2) # Ускорения  
   
 # Начальные условия - синусоидальное возмущение  
 for i in 2:N+1  
 y[i] = initial\_displacement \* sin(pi\*(i-1)/N)  
 end  
   
 # Массивы для сохранения результатов  
 times = Float64[]  
 positions = Vector{Float64}[]  
 velocities = Vector{Float64}[]  
   
 # Основной цикл моделирования  
 for t in 0:dt:T  
 # Вычисление ускорений для внутренних частиц  
 for i in 2:N+1  
 dy\_prev = y[i] - y[i-1]  
 dy\_next = y[i+1] - y[i]  
   
 # Гармоническая часть силы  
 F\_harmonic = k \* (y[i+1] - 2\*y[i] + y[i-1])  
   
 # Ангармоническая часть силы (если alpha ≠ 0)  
 F\_anharmonic = alpha \* (dy\_next^3 + dy\_prev^3)  
   
 a[i] = (F\_harmonic + F\_anharmonic) / m  
 end  
   
 # Обновление скоростей и смещений (метод Верле)  
 for i in 2:N+1  
 v[i] += a[i] \* dt  
 y[i] += v[i] \* dt  
 end  
   
 # Применение граничных условий  
 y[1] = 0.0  
 y[N+2] = 0.0  
   
 # Сохранение состояния (не на каждом шаге для экономии памяти)  
 if mod(round(t/dt), save\_every) == 0  
 push!(times, t)  
 push!(positions, copy(y[2:N+1])) # Исключаем граничные точки  
 push!(velocities, copy(v[2:N+1]))  
 end  
 end  
   
 return times, positions, velocities  
end

# 4 Результаты

Выполнив моделирование, получим колебания гармонического осциллятора (рис. 1).

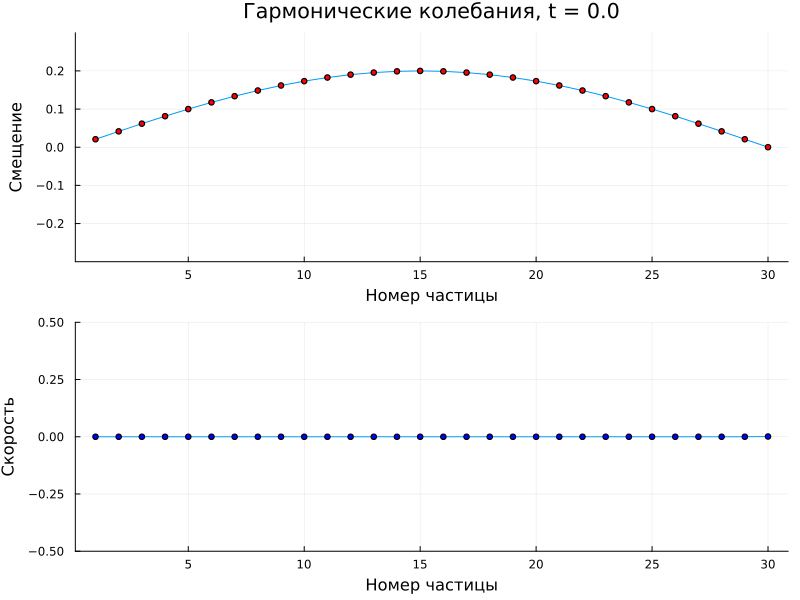


Рис. 1: Колебания гармонического осциллятора

Также смоделируем колебания ангармонического осциллятора при коэффициенте ангармоничности (рис. 2).

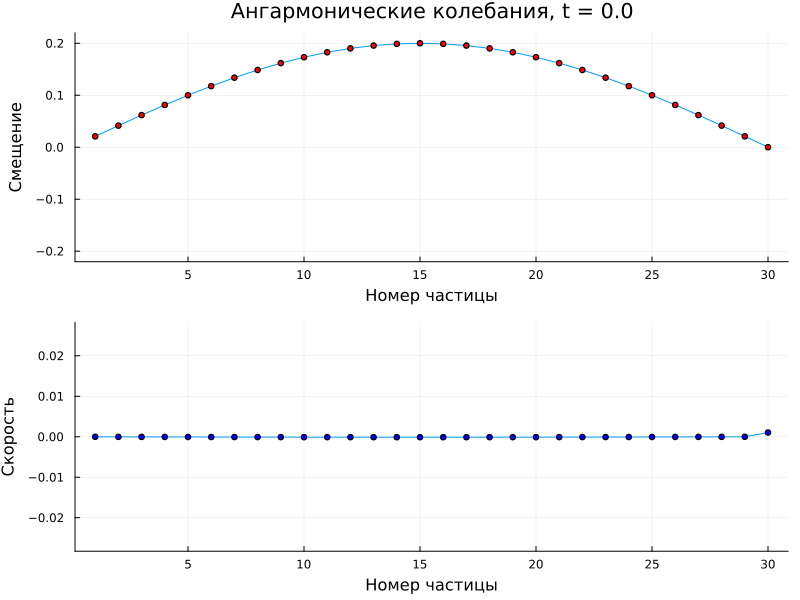


Рис. 2: Колебания ангармонического осциллятора

# 5 Выводы

* Построили модель цепочки из N частиц.
* Описали алгоритм для моделирования гармонических и ангармонических колебаний.
* Реализовали программу для моделирования гармонических и ангармонических колебаний.