

Этап 4

Результаты проекта

Канева Екатерина Клюкин Михаил
Ланцова Яна

Содержание

1	Введение	5
2	Теоретическое описание задачи	7
2.1	Гармоническая цепочка	7
2.1.1	Полная энергия системы	7
2.1.2	Решение уравнения	7
2.2	Ангармоническая цепочка	8
3	Программная реализация	9
4	Результаты	12
5	Выводы	14

Список иллюстраций

4.1	Колебания гармонического осциллятора	12
4.2	Колебания ангармонического осциллятора	13

Список таблиц

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 $x_i = id$. Вводятся малые смещения y_i от положения равновесия y_i (считаем, что y_i много меньше d). Тогда силы, действующие на i -ю частицу, записываются как:

$$F_i = k(y_{i+1} - y_i) - k(y_i - y_{i-1}) = k(y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}).$$

Соответственно, уравнение движения имеет вид:

$$m \frac{d^2 y_i}{dt^2} = k(y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}), \quad i = 1, \dots, N.$$

2.1.1 Полная энергия системы

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

$$U = \frac{m}{2} \sum_{i=1}^N \left(\frac{dy_i}{dt} \right)^2 + \frac{k}{2} \sum_{i=1}^{N+1} (y_i - y_{i-1})^2.$$

2.1.2 Решение уравнения

Физически обоснованным решением является форма стоячей волны:

$$y_i = (A \cos(px_i) + B \sin(px_i)) \cos(\omega t).$$

Граничные условия $y_0 = 0$ и $y_{N+1} = 0$ приводят к ограничению на p :

$$\sin(p(N+1)d) = 0.$$

Это выполняется при значениях:

$$p_l = \frac{l\pi}{(N+1)d}, \quad l = 1, \dots, N.$$

2.2 Анггармоническая цепочка

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

$$F = -kx \left(1 - \frac{\alpha x}{d} \right).$$

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

$$U = \frac{m}{2} \sum_{i=1}^N \left(\frac{dy_i}{dt} \right)^2 + \frac{k}{2} \sum_{i=1}^{N+1} (y_i - y_{i-1})^2 - \frac{k\alpha}{3d} \sum_{i=1}^{N+1} (y_i - y_{i-1})^3.$$

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])

        # Анггармоническая 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
    end
end

```

```

        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. 4.1).

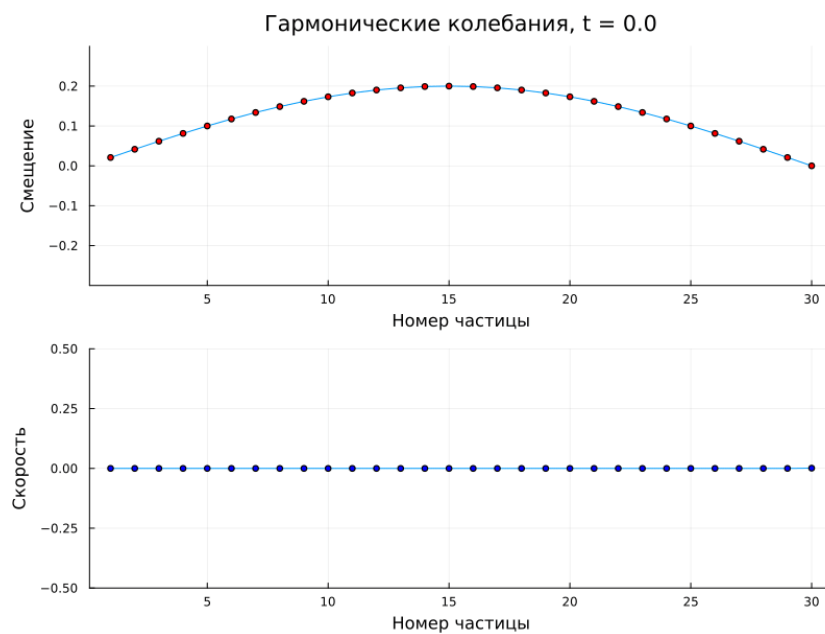


Рис. 4.1: Колебания гармонического осциллятора

Также смоделируем колебания ангармонического осциллятора при коэффициенте ангармоничности $\alpha = 50$ (рис. 4.2).

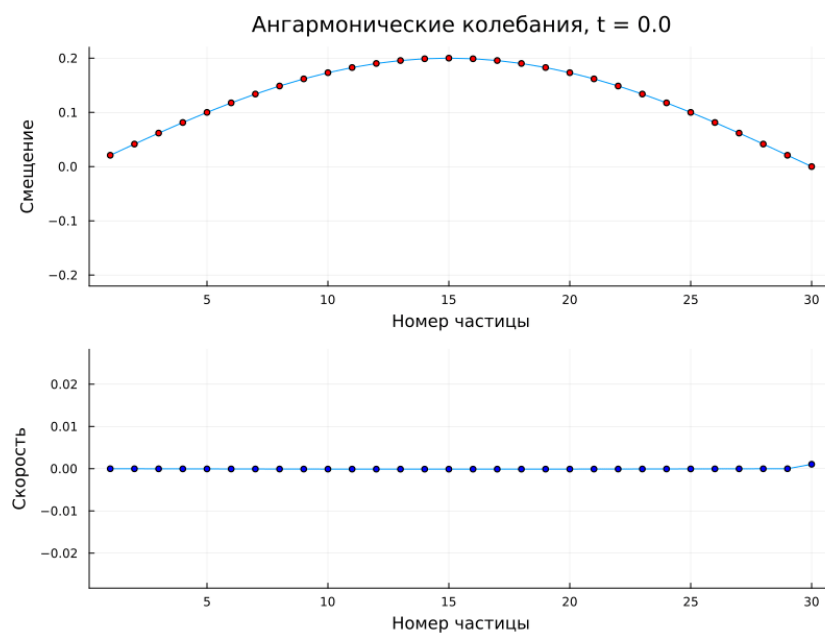


Рис. 4.2: Колебания ангармонического осциллятора

5 Выводы

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