Этап 1

Научная проблема проекта Колебания цепочек

Канева Екатерина Клюкин Михаил
Ланцова Яна

Содержание

Список иллюстраций

Список таблиц

1 Введение

1.1 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.

1.2 Цель работы

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

1.3 Объект и предмет исследования

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

1.4 Задачи

1. Построить модель цепочки из N частиц.
2. Задать начальные условия в виде гармоники и измерить собственную частоту. Сравнить результаты с теоретическими
3. Проверить, используя преобразования Фурье координат и скоростей частиц, что энергия каждой гармоники не меняется
4. Рассмотреть цепочку с чередующимися частицами

2 Теоретическое описание задачи

2.1 Колебания цепочек

Все тела состоят из атомов. Представим движение атомов, связанных вместе пружинами. Эти колебания, называемые фононами, переносят энергию и импульс через материал, определяя его тепловые и оптические свойства. Колебания цепочек позволяют понять, как тепло распространяется в твёрдых телах, почему закон cV = 3R Дюлонга и Пти хорошо выполняется при не слишком низких температурах, пока влияние квантовых эффектов невелико. Модели колебаний цепочек варьируются от простых одномерных моделей до сложных трёхмерных расчётов, учитывающих взаимодействие между атомами и дефекты решётки.

2.2 Гармоническая цепочка

Рассмотрим простейшую модель, используемую для описания колебаний атомов в твёрдом теле. Она состоит из N идентичных точечных частиц, каждая массой m, расположенных вдоль прямой линии и соединённых между собой идеальными пружинками с одинаковой жёсткостью k. Крайние частицы прикреплены к неподвижным стенкам при помощи пружин. Таким образом, всего в системе N+1 пружин, каждая из которых имеет длину d.

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:

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

2.2.1 Полная энергия системы

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

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

2.2.2 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:

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

2.2.3 Дисперсионное соотношение

Подставляя p_l в уравнение движения, получаем:

$$\omega_l = 2\omega_0 \sin\left(\frac{l\pi}{2(N+1)}\right), \quad l = 1, \dots, N,$$

где $\omega_0 = \sqrt{k/m}$.

2.2.4 Собственные моды

В системе существуют различные моды колебаний, соответствующие различным p_l. Эти моды не взаимодействуют между собой и называются гармониками. В музыке волна с волновым числом p_1 называется основным тоном, а остальные — обертонами.

2.3 Ангармоническая 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:

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

В 1950-х годах Э. Ферми, С. Улам и Д. Паста (FPU) предложили задачу, связанную с нелинейными колебаниями, для численного решения на одном из первых компьютеров MANIAC-I. В рассмотренной модели энергия одной пружины описывалась уравнением с дополнительными нелинейными членами. Ожидалось, что из-за нелинейных эффектов система постепенно термализуется, то есть энергия равномерно распределится по всем модам колебаний.

Однако расчеты показали неожиданный результат: никакой термализации не происходило. Вместо этого энергия, начавшаяся с первой моды, распределялась лишь между небольшим числом других мод. В частности, в системе из 32 частиц моды с номерами больше 5 получали менее 1 % энергии. Более того, через относительно короткое время (~160 периодов основной моды) система возвращалась в состояние, почти идентичное начальному. Такое поведение получило название квазипериодичности.

Этот эффект вызвал большой интерес к нелинейным динамическим системам. Более длительные расчеты показали, что возврат к начальному состоянию был неполным: около 98 % энергии возвращалось, но со временем дефицит увеличивался. Это дало надежду на возможную термализацию, если ждать достаточно долго. Однако спустя 8 “больших периодов” разница начала уменьшаться, а через 16 периодов произошел практически полный возврат к начальному состоянию. Это явление получило название сверхпериодичности.

Исследования FPU продолжались около 20 лет, используя методы математики и механики, и привели к множеству открытий. Одним из главных последствий стало то, что эта задача положила начало численному моделированию в физике.

2.4 Выводы

На первом этапе группового проекта мы сделали теоретическое описание модели гармнонических и ангармонических колебаний и определили задачи дальнейшего исследования.