

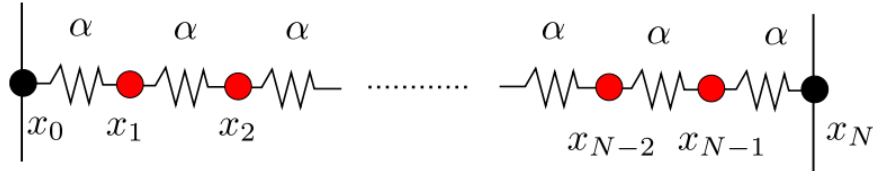
Wydział, kierunek: WFiIS, FT	Imię i nazwisko: Marcin Mikołajczyk	Rok: 3	Grupa: 2
Data wykonania: 24 czerwca 2025	Data oddania: 24 czerwca 2025	OCENA:	

## Projekt 4: Dynamika jednowymiarowego łańcucha atomów

### 1 Wstęp teoretyczny

Celem laboratorium jest analiza dynamiki jednowymiarowego łańcucha atomów z wykorzystaniem formalizmu Lagrange'a. W szczególności badamy propagację zaburzeń i zjawisko rezonansu mechanicznego w łańcuchu atomowym. Dzięki numerycznej symulacji ewolucji czasowej układu możemy śledzić zmiany energii kinetycznej, potencjalnej i całkowitej, a także obserwować zachowanie poszczególnych atomów w czasie.

Analizowany łańcuch atomów pokazano na rysunku 1. Zakładamy, że każdy atom ma masę  $m$ . Położenia atomów opisane są funkcjami  $x_i(t)$ . W stanie spoczynku położenia atomów opisuje zależność  $x_{i,0} = \Delta \cdot i$ ,  $i = 0, 1, \dots, N$ , gdzie  $\Delta$  jest równowagową odległością międzyatomową. Położenia dwóch skrajnych atomów są ustalone:  $x_0 = 0$  oraz  $x_N = x_{\max}$ . Każdy atom oddziałuje sprężystością tylko ze swoim lewym i prawym sąsiadem, przy czym w stanie równowagi oddziaływania znikają.



Rysunek 1: Jednowymiarowy łańcuch atomów. [1]

Energia potencjalna pary atomów dana jest przez:

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

Całkowita energia kinetyczna:

$$T = \sum_{i=0}^N \frac{m}{2} \dot{x}_i^2$$

Całkowita energia potencjalna:

$$U = \sum_{i=1}^N \frac{\alpha}{2} (x_{i-1} - x_i + \Delta)^2$$

Równania ruchu wyznaczamy z równania Eulera-Lagrange'a:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} - \frac{\partial L}{\partial x_i} = 0$$

co daje:

$$\ddot{x}_i = \frac{\alpha}{m}(x_{i-1} - 2x_i + x_{i+1})$$

Dla drgań własnych przy ustalonych końcach rozwiązaniem jest fala stojąca:

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

co prowadzi do zależności dyspersji:

$$\omega^2 = \frac{4\alpha}{m} \sin^2\left(\frac{k\Delta}{2}\right)$$

i kwantyzację liczby falowej:

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

## 2 Zadania do wykonania

1. Przyjąć parametry symulacji:  $N = 50$ ,  $\Delta t = 0.02$ ,  $\Delta = 0.1$ ,  $\alpha = 1$ ,  $m = 1$ .

### 2. Propagacja zaburzenia:

Warunek początkowy położzeń:

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

Brak prędkości początkowych:  $\dot{x}_i = 0$ .

Symulacja dla  $nt = 5000$  kroków czasowych. Zarejestrować w czasie: energię kinetyczną, potencjalną, całkowitą oraz wychylenia atomów. Sporządzić mapę zmian położenia w czasie.

### 3. Rezonans mechaniczny:

Warunki początkowe:  $x_i = x_{i,0}$ ,  $\dot{x}_i = 0$ .

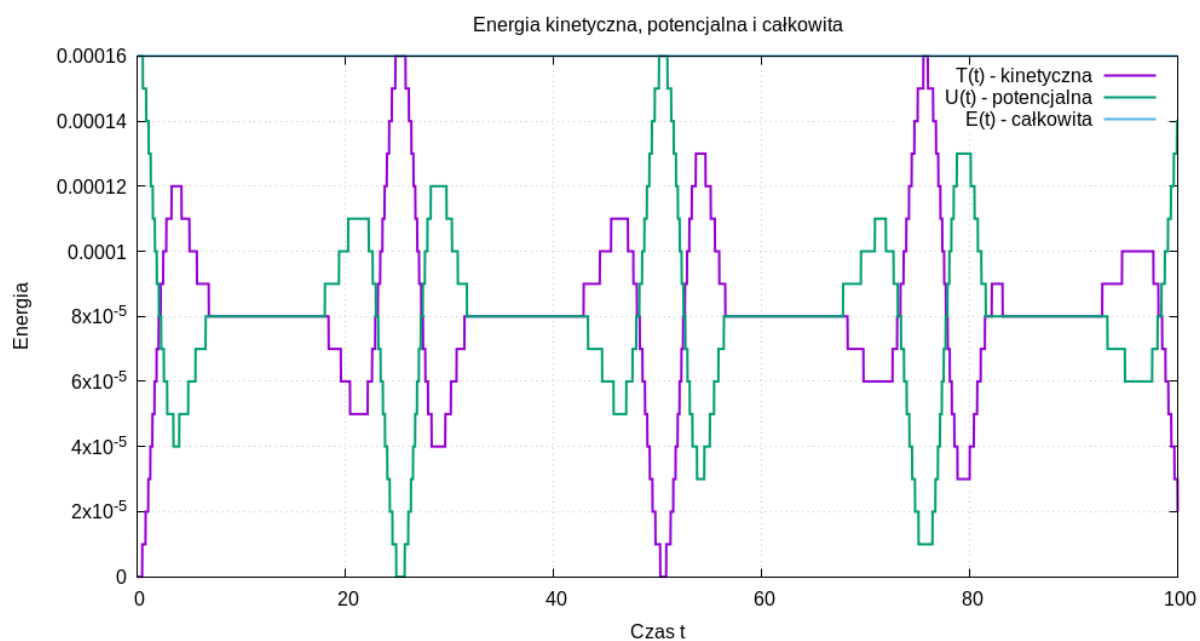
Pobudzany jest atom  $m = 1$  siłą o częstości  $\omega_n$ :

$$\dot{s}_m = \frac{\alpha}{m}(s_{m-1} - 2s_m + s_{m+1}) + \frac{F}{m} \sin(\omega_n t), \quad F = 0.01$$

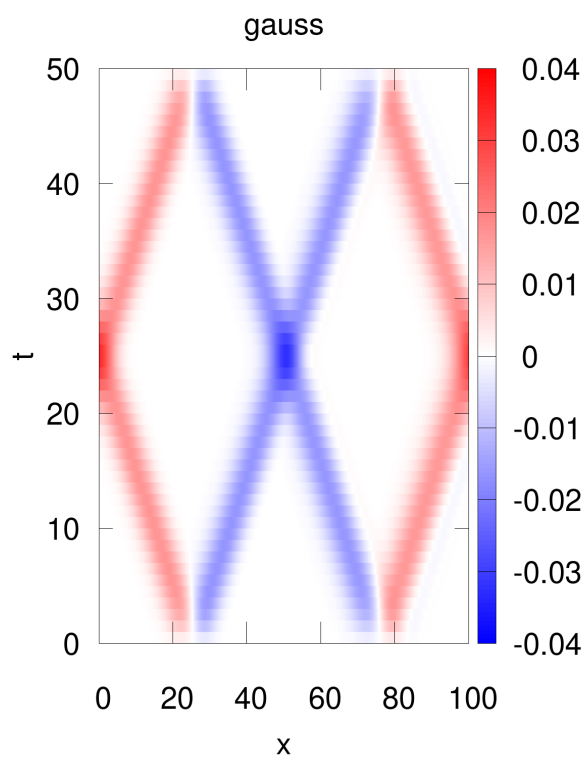
Wykonać symulację dla  $n = 0.9, 1.0, 1.1, 1.5, 2.0, 5.0$ . Czas symulacji:  $t_{\max} = 20 \cdot \frac{2\pi}{\omega_n}$ ,  $nt = \text{int}(t_{\max}/\Delta t)$ .

Sporządzić wykresy energii i wychylenia atomów w czasie.

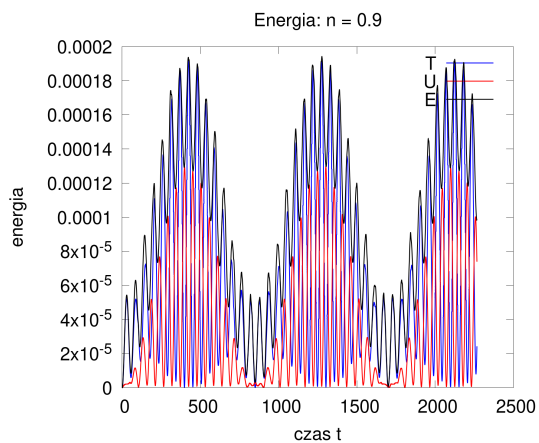
### 3 Wyniki



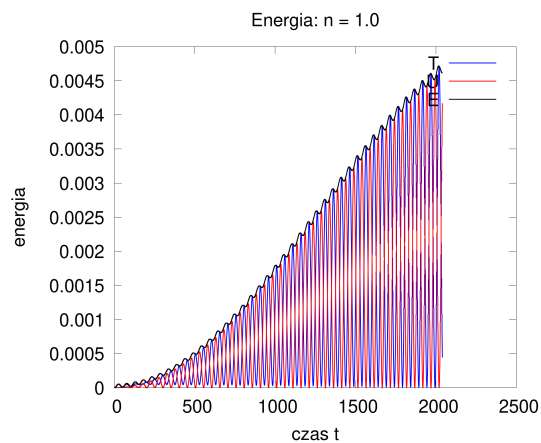
Rysunek 2: Zmiany energii w czasie dla warunków początkowych (zaburzenie Gaussa).



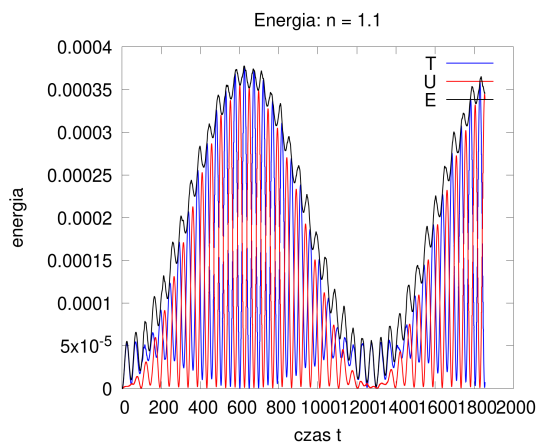
Rysunek 3: Mapa zmian położenia atomów w czasie dla zaburzenia Gaussa.



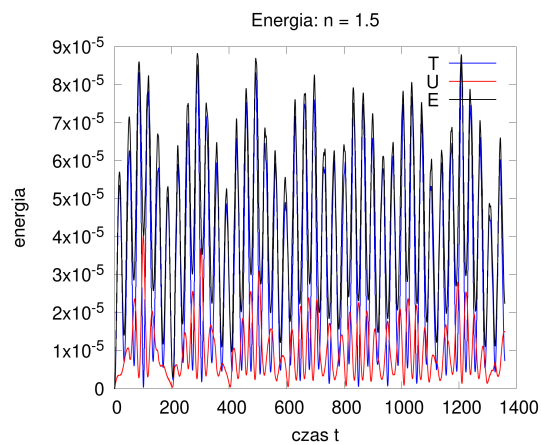
Rysunek 4: Energie dla  $n = 0,9$ .



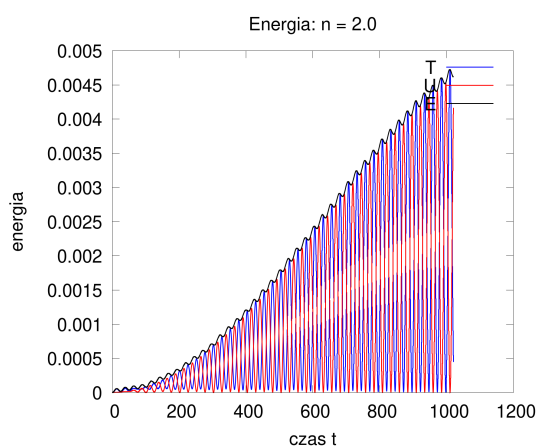
Rysunek 5: Energie dla  $n = 1,0$ .



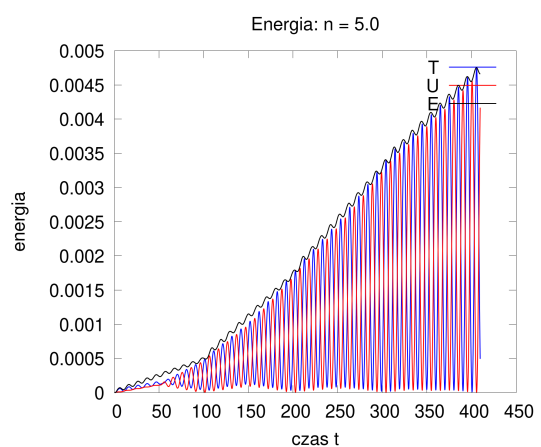
Rysunek 6: Energie dla  $n = 1,1$ .



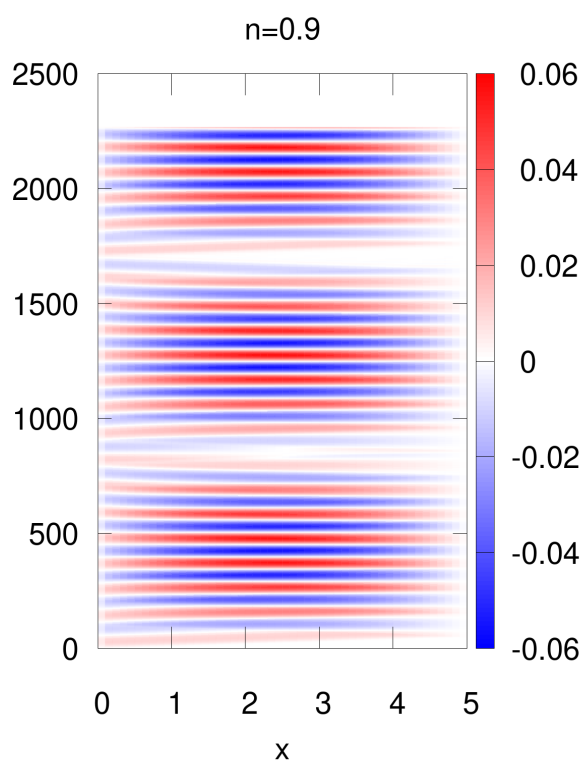
Rysunek 7: Energie dla  $n = 1,5$ .



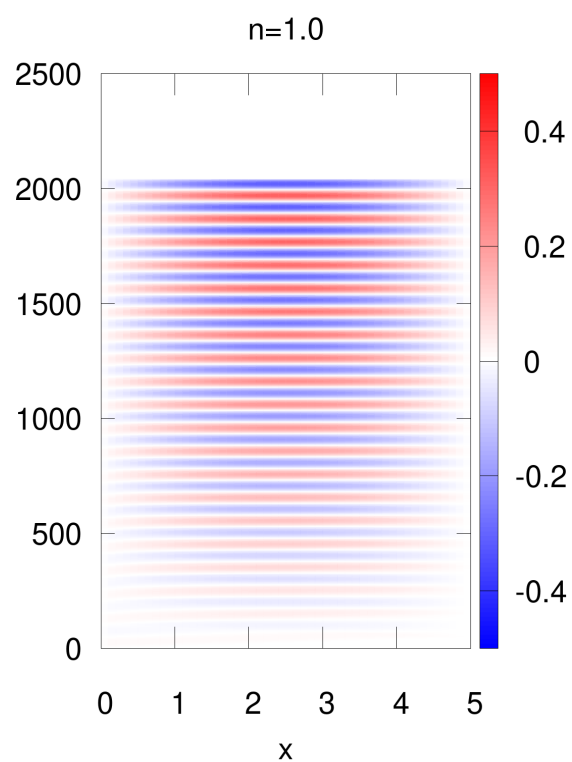
Rysunek 8: Energie dla  $n = 2,0$ .



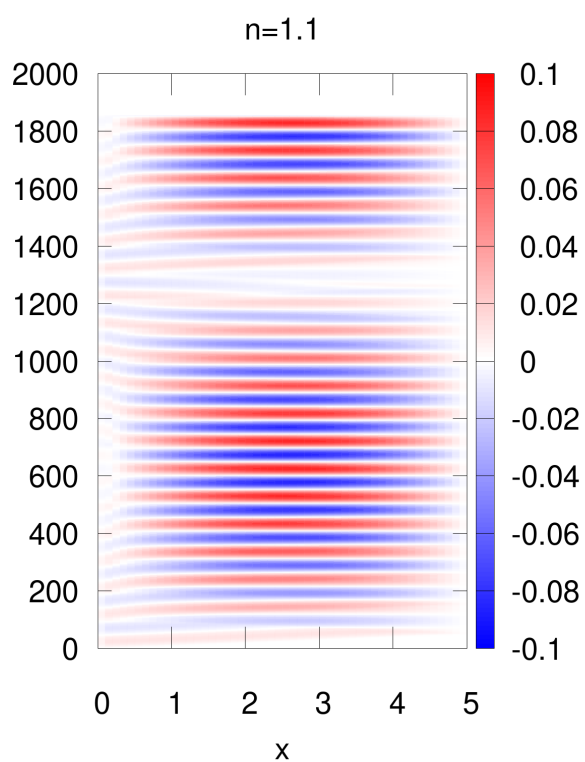
Rysunek 9: Energie dla  $n = 5,0$ .



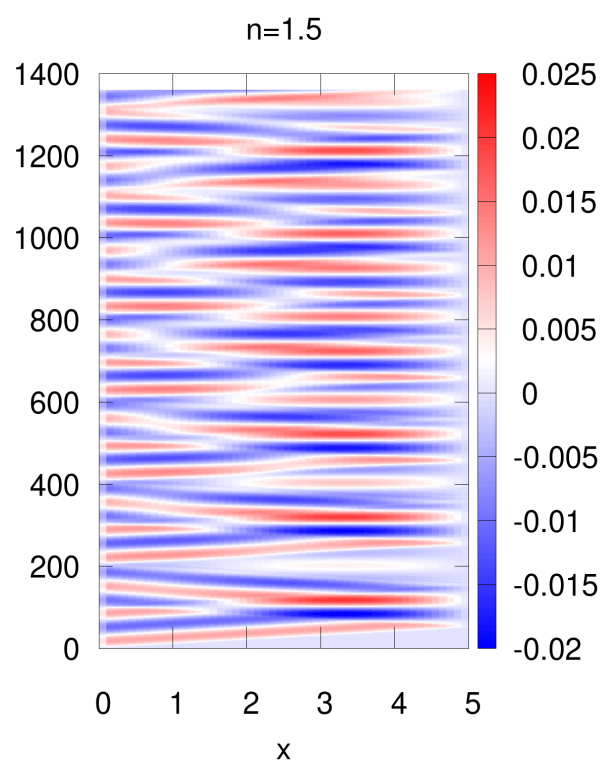
Rysunek 10: Rozchodzenie się zaburzenia dla  $n = 0,9$ .



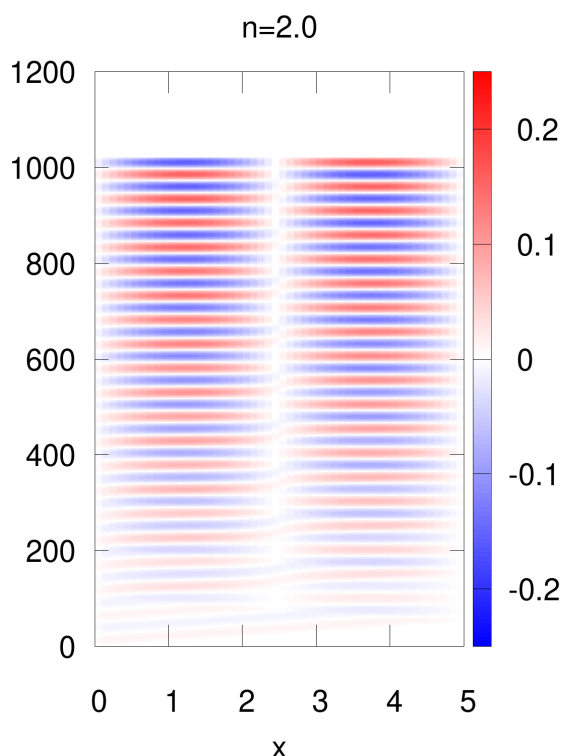
Rysunek 11: Rozchodzenie się zaburzenia dla  $n = 1,0$ .



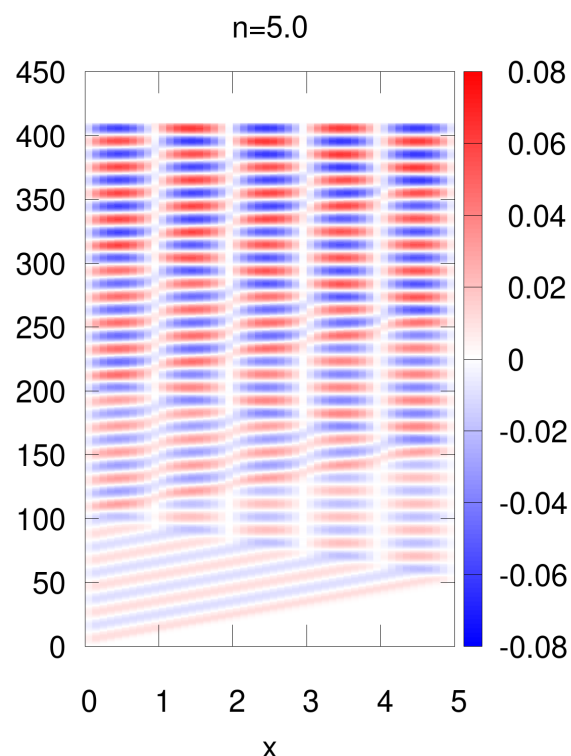
Rysunek 12: Rozchodzenie się zaburzenia dla  $n = 1,1$ .



Rysunek 13: Rozchodzenie się zaburzenia dla  $n = 1,5$ .



Rysunek 14: Rozchodzenie się zaburzenia dla  $n = 2,0$ .



Rysunek 15: Rozchodzenie się zaburzenia dla  $n = 5,0$ .

## Obserwacje

- Dla  $n < 1$  (np.  $n = 0,9$ ) obserwujemy dominację energii potencjalnej i częściowe zatrzymanie zaburzenia — fala nie rozchodzi się swobodnie.
- Dla  $n = 1$  energia całkowita jest zachowana z bardzo dobrą dokładnością, a zaburzenie rozchodzi się w sposób symetryczny i bez dyspersji.
- Dla  $n > 1$  (np.  $n = 1,1, 1,5, 2,0, 5,0$ ) fala rozchodzi się z większą prędkością, a pojawia się zauważalna dyspersja — fala ulega rozmyciu.
- Całkowita energia układu pozostaje zachowana z bardzo dobrą dokładnością we wszystkich przypadkach, co potwierdza poprawność implementacji metody całkowania RK4.

## 4 Wnioski

Symulacje propagacji zaburzenia pokazały rozchodzenie się impulsu w łańcuchu w obu kierunkach oraz odbicia od ustalonych końców. Energia całkowita pozostaje zachowana z niewielkimi fluktuacjami numerycznymi.

W eksperymencie rezonansowym zaobserwowano znaczny wzrost energii i amplitudy drgań dla wartości  $n$  bliskich całkowitym, zgodnie z przewidywaniami teoretycznymi. Dla wartości  $n$  oddalonych od rezonansu system wykazuje jedynie niewielką odpowiedź, co potwierdza selektywność odpowiedzi rezonansowej łańcucha.

## Literatura

- [1] *Instrukcja do ćwiczenia UPEL*