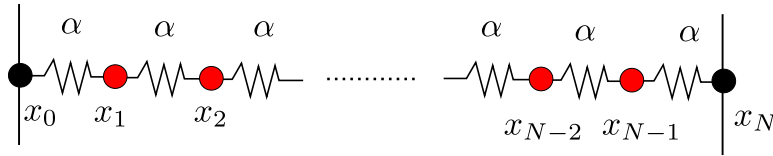


Projekt 4: dynamika jednowymiarowego łańcucha atomów

4 stycznia 2019

1 Wstęp



Rysunek 1: Jednowymiarowy łańcuch atomów.

Na zajęciach wykorzystamy formalizm Lagrange'a do przeanalizowania kilku szczególnych przypadków zachowania jednowymiarowego łańcucha atomów pokazanego 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 Δ 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:

$$U_{i,j} = \frac{\alpha}{2} [(x_i - \Delta \cdot i) - (x_j - \Delta \cdot j)]^2 \quad (1)$$

gdzie: $(x_i - \Delta \cdot i)$ jest wychyleniem z położenia równowagi i -tego atomu, α - stała sprężystości. Lagranżjan układu $L = T - U$ konstruujemy wyznaczając osobno wkłady do całkowitej energii kinetycznej

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

oraz do energii potencjalnej

$$U = \sum_{i=1}^N U_{i-1,i} = \sum_{i=1}^N \frac{\alpha}{2} (x_{i-1} - x_i + \Delta)^2 \quad (3)$$

Z równania Eulera-Lagrange'a

$$\frac{\partial L}{\partial x_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} = 0 \quad (4)$$

wyznaczamy równanie ruchu i -tej cząstki

$$\ddot{x}_i = \frac{\alpha}{m} (x_{i-1} - 2x_i + x_{i+1}) \quad (5)$$

1.1 drgania kolektywne - mody własne układu

Ponieważ położenia atomów na obu końcach łańcucha są ustalone, możemy się spodziewać że jednym z dopuszczalnych rozwiązań opisujących ruch atomów będzie fala stojąca, tzn. wszystkie atomy będą

drgać z jednakową częstotścią własną. Ze względu na warunki brzegowe rozwiązanie takie dla i – tego atomu ma postać

$$x_i(t) = x_{i,0} + A_i \sin(k x_i) \cos(\omega t) \quad (6)$$

gdzie: $x_{i,0}$ - położenie spoczynkowe, A_i - amplituda drgań, k - liczba falowa, ω - częstota drgań. Po wstawieniu zależności (6) do równania (5) i skorzystaniu z zależności trygonometrycznych

$$\sin(kx_{i\pm 1}) = \sin(kx \pm k\Delta) = \sin(kx) \cos(k\Delta) \pm \sin(k\Delta) \cos(kx) \quad (7)$$

otrzymujemy

$$\omega^2 = 2 \frac{\alpha}{m} [1 - \cos(k\Delta)] = 4 \frac{\alpha}{m} \sin^2 \left(\frac{k\Delta}{2} \right) \quad (8)$$

Z warunku brzegowego

$$k x_{max} = n\pi, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (9)$$

dla $x_{max} = \Delta \cdot N$ dostajemy relację opisującą liczbę falową modów własnych

$$k_n = \frac{n\pi}{N\Delta} \quad (10)$$

oraz dyskretne częstoty drgań [relacja dyspersji $\omega(k)$]

$$\omega_n = 2 \sqrt{\frac{\alpha}{m}} \left| \sin \frac{n\pi}{2N} \right| \quad (11)$$

1.2 ewolucja czasowa

Każdy atom opisywany jest dwiema zmiennymi: położeniową $x_i(t)$ oraz prędkościową $\dot{x}_i(t)$. Ponieważ atomów mamy $(N + 1)$, więc wszystkich zmiennych będzie $2(N + 1)$. Wprowadzamy nowe zmienne

$$s_i = x_i, \quad i = 0, 1, \dots, N \quad (12)$$

$$s_{N+1+i} = \dot{x}_i, \quad i = 0, 1, \dots, N \quad (13)$$

oraz określamy ich pochodne czasowe (dla węzłów wewnętrznych)

$$\dot{s}_i = s_{N+1+i}, \quad i = 1, 2, \dots, N - 1 \quad (14)$$

$$\dot{s}_{N+1+i} = \frac{\alpha}{m} (s_{i-1} - 2s_i + s_{i+1}), \quad i = 1, 2, \dots, N - 1 \quad (15)$$

oraz dla węzłów skrajnych (warunek brzegowy)

$$\dot{s}_0 = 0 \quad (16)$$

$$\dot{s}_N = 0 \quad (17)$$

$$\dot{s}_{N+1} = 0 \quad (18)$$

$$\dot{s}_{2N+1} = 0 \quad (19)$$

Równania (14)-(19) implementujemy w procedurze do liczenia pochodnych. Równania (14) i (15) obliczamy w pętli, a warunki (16)-(19) dopisujemy za pętlą. Uwaga: **Zmienną N możemy przekazywać do procedury jako argument lub zadeklarować i używać jako zmienną globalną w programie.**

2 Zadania do wykonania

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

2. Symulacja propagacji zaburzenia w łańcuchu.

Jako warunek początkowy przyjmujemy rozkład położenia atomów

$$s_i = x_{i,0} + \frac{\Delta}{3} \exp\left(-\frac{(x_{i,0} - \frac{x_{max}}{2})^2}{2\sigma^2}\right), \quad i = 0, 1, \dots, N \quad (20)$$

gdzie: $\sigma = 3 \cdot \Delta$, oraz brak prędkości liniowej

$$\dot{s}_{N+1+i} = 0, \quad i = 0, 1, \dots, N \quad (21)$$

Wykonać symulację dla $n_t = 5000$ kroków czasowych. Sporządzić wykresy energii: kinetycznej, potencjalnej oraz całkowitej w funkcji czasu. W każdej chwili czasowej zapisać do pliku wychYLENIA wszystkich cząstek z położenia równowagi. Po zakończeniu symulacji sprządzić mapę zmian położenia cząstek w czasie.

3. Rezonans mechaniczny.

Jako warunek początkowy przyjmujemy, że atomy spoczywają w położeniach równowagi

$$s_i = x_{i,0}, \quad i = 0, 1, \dots, N \quad (22)$$

oraz brak prędkości początkowej

$$\dot{s}_{N+1+i} = 0, \quad i = 0, 1, \dots, N \quad (23)$$

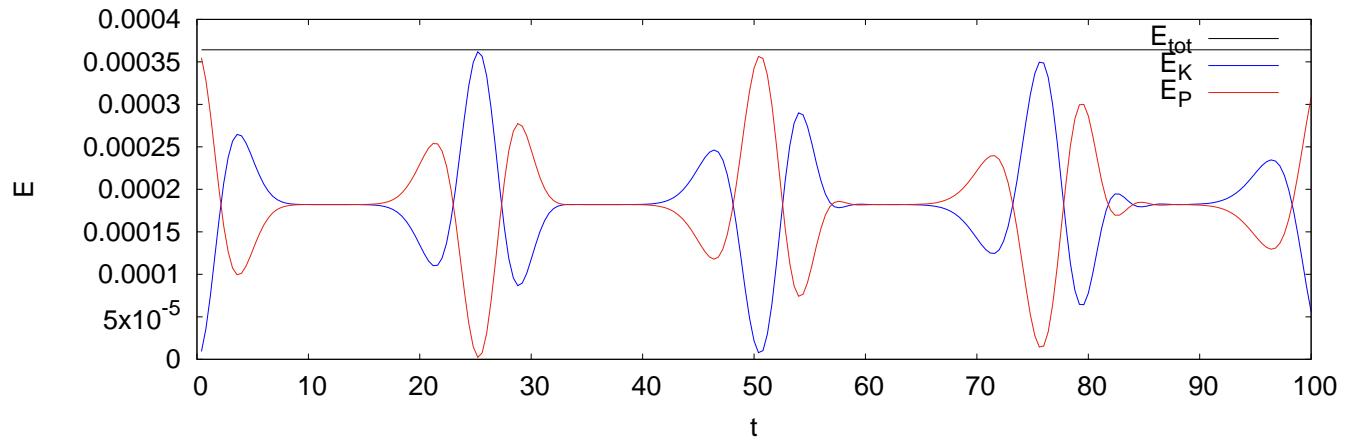
Następnie określamy częstość siły wymuszającej zgodnie z wzorem (11) i ustalamy czas prowadzenia symulacji jako $t_{max} = 20 \cdot \frac{2\pi}{\omega_n}$, liczbę kroków czasowych ustalamy jako $n_t = (int)(t_{max}/\Delta t)$. Atom o numerze $m = 1$ pobudzamy siłą o zadanej częstości ω_n , czyli modyfikujemy jego pochodną w procedurze do liczenia pochodnych (można to zrobić za pętlą)

$$\dot{s}_m = \frac{\alpha}{m}(s_{m-1} - 2s_m + s_{m+1}) + \frac{F}{m} \sin(\omega_n t) \quad (24)$$

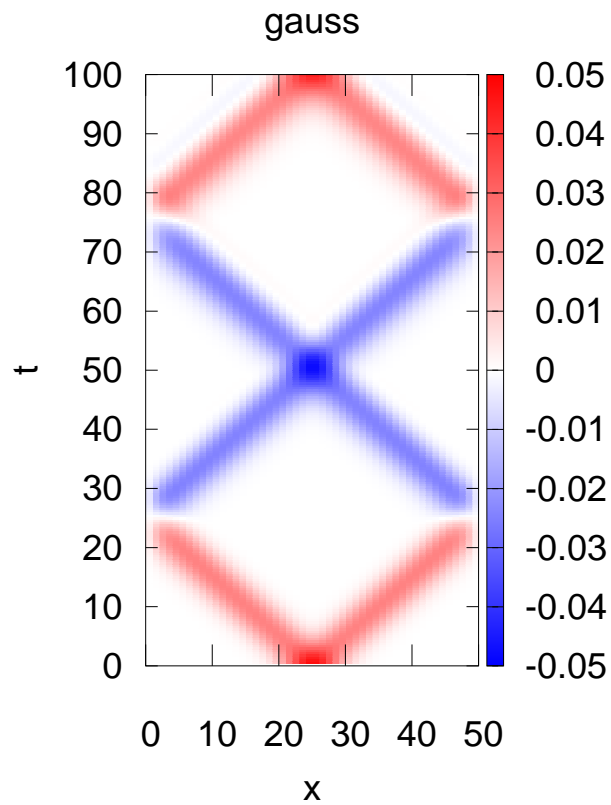
gdzie: $F = 0.01$ jest amplitudą wymuszenia. Wykonać wykresy zmian energii w czasie (U , T oraz $E = T + U$) oraz zmiany wychYLENIA atomów w czasie dla: $n = 0.9; 1.0; 1.1; 1.5; 2.0; 5.0$. Oczywiście dla n całkowitego spełniony jest warunek rezonansowy i powinniśmy zaobserwować wzrost amplitudy drgań w łańcuchu.

2.1 Przykładowe wyniki

(a)

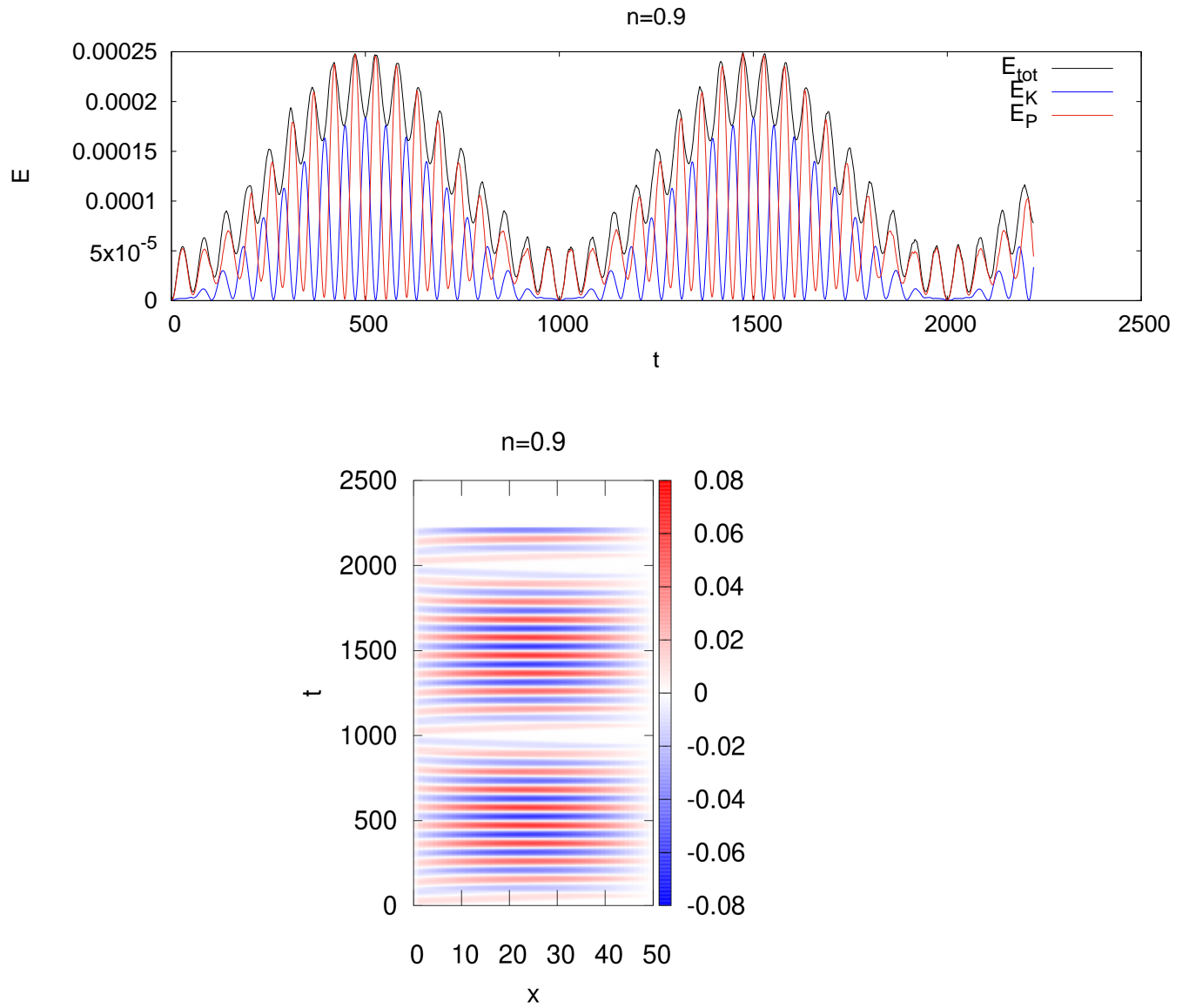


(b)



Rysunek 2: Wyniki dla warunków początkowych danych wzorami (20) i (21). (a) zmiany energii w układzie, (b) zmiany położenia atomów w czasie symulacji.

(a)



Rysunek 3: Wyniki dla wymuszenia działającego na atom $m = 1$ (wzór 24) oraz $n = 0.9$ (wzór 11).