**АННОТАЦИЯ**

Тема: «Преобразование механической энергии в тепловую в одномерном кристалле»

Автор: Старобинский Е.В.

Научный руководитель: Кривцов А.М.

Cовременные нанотехнологии позволяют получать практически идеальные (безде-

фектные) материалы, отличающиеся по своим свойствам от материалов с дефектами. В частности, тепловые процессы в таких наноструктурах протекают по иным, более сложным законам, чем для тел макроуровня. Знание этих законов и особенностей поведения наносистем имеет большое практическое значение при разработке новых устройств и расширении области применения наноматериалов, в том числе на промышленном уровне. Однако описание наносистем с помощью существующих моделей сопряжено с существенными противоречиями экспериментальным данным, что связано как с отсутствием цельной теории, позволяющей описывать процессы наноуровня, так и с трудоёмкостью проведения натурных экспериментов. Компромиссом является численное моделирование наноструктур, при котором поведение материала является прямым следствием уравнений динамики. Минус такого подхода - необходимость рассчитывать крупные фрагменты материала, чтобы за исследумое время возмущение не успевало дойти до границ. Следовательно, требуются большие вычислительные мощности.

В 1953 году на суперкомпьютере Maniac I группа учёных, состоящая из Энрико Фер-

ми, Станислава Улама, Джона Паста и Мэри Цингоу, численно решила задачу Коши для системы дифференциальных уравнений, описывающую одномерный кристалл с нелинейным взаимодействием между частицами.

В данной работе рассматривается одна из нелинейных моделей кристалла, описанных Энрико Ферми. Ключевым отличием является введение тепловой энергии через задание дисперсии начальных скоростей.

В работе проведено исследование перехода механической энергии в тепловую в одно

мерном кристалле. В качестве модели кристалла рассмотрена цепочка частиц одинаковой массы. Взаимодействие между частицами нелинейное: выражения для сил содержат квадратичную зависимость от расстояния между частицами.

Начальная механическая энергия системы задана с помощью синусоидальной волны.

Рассмотрены две постановки: стоячая волна и бегущая волна, распространяющаяся в одном направлении. Начальные скорости частиц определены таким образом, чтобы удовлетворить равномерному температурному профилю в начальный момент времени.

Заданная механическая энергия с течением времени переходит в тепловую. Продемонстрирована необратимость этого процесса, при увеличении дисперсии механическая энергия убывает быстрее. Показано, что энергия стоячей волны убывает в 4 раза быстрее энергии бегущей волны при одних параметрах эксперимента.

Ключевые слова: нанотехнологии, наноструктуры, модель кристалла.

ANNOTATION

Theme: "The transformation of mechanical energy into thermal energy in a one-dimensional crystal"

Author: Starobinski E.V.

Scientific adviser: Krivtsov А.М.

Modern nanotechnology allows you to obtain almost perfect (defect-free) materials that differ in their properties from materials with defects. In particular, the thermal processes in such nanostructures proceed according to different, more complicated laws than for bodies at the macrolevel. Knowledge of these laws and behavioral patterns of nanosystems is of great practical importance in the development of new devices and the expansion of the field of application of nanomaterials, including at the industrial level. However, the description of nanosystems with the help of existing models is associated with significant contradictions in the experimental data, which is connected both with the absence of an integral theory that allows describing the processes of the nanoscale, and with the laboriousness of carrying out field experiments. Compromise is the numerical simulation of nanostructures, in which the behavior of the material is a direct consequence of the equations of dynamics. The disadvantage of this approach is the need to calculate large fragments of material so that during the time under investigation the disturbance does not have time to reach the boundaries. Consequently, large computing powers are required.

       In 1953 on the supercomputer Maniac I a group of scientists, consisting of Enrico Fermi,

Stanislav Ulam, John Pasta and Mary Qinggou, numerically solved the Cauchy problem for a system of differential equations, describing a one-dimensional crystal with nonlinear interaction between particles.

        In this paper we consider one of the nonlinear crystal models described by Enrico Fermi. The key difference is the introduction of thermal energy through the specification of the dispersion of initial velocities.

   In this work, the transition of mechanical energy into thermal energy into one dimensional crystal. As a model of a crystal, a chain of particles of the same mass is considered. The interaction between the particles is nonlinear: the expressions for the forces contain a quadratic dependence on the distance between the particles.

        The initial mechanical energy of the system is given by means of a sinusoidal wave.

Two statements are considered: a standing wave and a traveling wave propagating in one direction. The initial velocities of the particles are determined in such a way as to satisfy the uniform temperature profile at the initial instant of time.

The specified mechanical energy transforms into thermal energy over time. The irreversibility of this process is demonstrated, as the dispersion increases, the mechanical energy decreases more rapidly. It is shown that the energy of a standing wave decreases 4 times faster than the energy of a traveling wave for some experimental parameters.

Keywords: nanotechnology, nanostructure, crystal model.