

Содержание

1	Обозначения	2
2	Введение	3
3	Модель цепочки	4
3.1	Параметры модели	4
3.2	Потенциал взаимодействия	5
3.3	Периодические граничные условия	6
3.4	Список взаимодействующих частиц	7
3.5	Модифицированный алгоритм Верле (Leapfrog)	7
4	Влияние параметров цепочки на зависимость теплового давления от тепловой энергии $p_T(E_T)$	8
4.1	Влияние длины цепочки на $p_T(E_T)$	8
4.2	Влияние n на $p_T(E_T)$ при $\varepsilon = 0$	8
4.3	Влияние n на $p_T(E_T)$ при растяжении	9
4.4	Влияние n на $p_T(E_T)$ при сжатии	10
4.5	Влияние жесткости цепочки на $p_T(E_T)$	11
4.6	Вывод	12
5	Растяжение цепочки	14
6	Сжатие цепочки	16
7	Заключение	20

1 Обозначения

- n – число частиц в цепочке
- \mathbf{r}_i – радиус-вектор i -ой частицы, $i = \overline{1, n}$
- a_0 – равновесное расстояние между частицами
- a_{cut} – радиус обрезания
- a – расстояние между частицами в начальный момент времени
- D – энергия взаимодействия в потенциале Леннарда-Джонса
- c_l – продольная жесткость
- c_s – изгибная жесткость
- ε – относительная деформация
- p_T – тепловое давление
- E_T – тепловая энергия

2 Введение

Большинство известных веществ имеют положительный коэффициент теплового расширения. Это означает, что при увеличении температуры вещество расширяется, увеличивая занимаемый объем. Но существуют вещества, обладающие отрицательным коэффициентом теплового расширения. Хорошо известный пример - лед [1]. Но помимо льда отрицательным коэффициентом теплового расширения обладают и многие другие вещества, которые активно используются в науке и технике [2], [3]. Поэтому исследование физических процессов, лежащих в основе отрицательного теплового расширения, является актуальной проблемой. Основной причиной теплового расширения веществ являются продольные и поперечные колебания частиц [3], поэтому аналитическое предсказание зависимости коэффициента теплового расширения от микроскопических свойств вещества является довольно трудной задачей, решение которой предполагает использование методов статистической физики [4]. Минус такого подхода в том, что для получения результата необходимо произвести сложные математические расчеты, такие как, например, вычисление интеграла в N -мерном фазовом пространстве. Использование метода динамики частиц для решения данной задачи позволяет получить количественные и качественные результаты, избегая сложных вычислений.

В работе [5] было исследовано тепловое расширение цепочки с продольными и поперечными колебаниями частиц, обладающей только продольной жесткостью. В данной работе было показано, что параметр Грюнайзена меняется от $-\infty$ до $+\infty$ при изменении деформации цепочки от нуля до критического значения. Также аналитически и численно было показано, что зависимость температурного давления от температурной энергии нелинейна при малых деформациях цепочки, а при некоторых значениях деформации еще и не монотонна. Из всего вышперечисленного делается предположение, что у реально существующих веществ зависимость температурного давления от температурной энергии при давлениях, близких к критическим, будет не линейной, что подтверждается экспериментальными данными. В связи с этим необходимо исследовать модель цепочки, более приближенную к реальной. Для этого предлагается поэтапно усложнять модель, добавляя в нее новые параметры.

В данной работе исследуется тепловое расширение двумерной цепочки с продольной и изгибной жесткостью, частицы которой совершают продольные и поперечные колебания. Целью данной работы является исследование свойств данной цепочки при растяжении, а так же сжатии при деформациях, меньших или равных критической.

3 Модель цепочки

3.1 Параметры модели

В данной работе моделирование цепочки проводится методом динамики частиц. Вид такой цепочки представлен на Рис. 1. В начальный момент времени частицы цепочки находятся на одинаковом расстоянии a друг от друга и обладают произвольными скоростями, равномерно распределенными в круге. Частицы цепочки обладают



Рис. 1: Цепочка

продольной и поперечной компонентой скорости, что приводит к наличию отрицательного теплового расширения. На каждую рассматриваемую частицу действует сила

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_1 + \mathbf{F}_{-1} \quad (1)$$

где \mathbf{F}_1 и \mathbf{F}_{-1} - силы, действующие на частицу со стороны ее соседей. Макроскопическими параметрами являются тепловое давление p_T и тепловая энергия E_T . Тепловое давление определяется формулой

$$p_T = p - p_0, \quad p = -\langle \mathbf{F}_1 \rangle \cdot \mathbf{e}_1 \quad (2)$$

Здесь $\langle \mathbf{F}_1 \rangle$ - средняя сила, действующая на рассматриваемую частицу в направлении вектора \mathbf{e}_1 , где \mathbf{e}_1 - вектор, коллинеарный цепочке в начальный момент времени. p_0 - холодное давление, характеризующее давление в цепочке в начальный момент времени. Тепловая энергия определяется соотношением

$$E_T = K_T + U_T, \quad K_T = \frac{m}{2} \langle \tilde{v}^2 \rangle, \quad U_T = \langle \Pi \rangle - \Pi_0 \quad (3)$$

здесь $\langle \Pi \rangle$ - среднее значение потенциала взаимодействия в актуальной конфигурации, Π_0 - значение потенциала взаимодействия, $\langle \tilde{v} \rangle$ - среднее значение модуля скорости.

Значения в данной модели для каждой точки на графике усредняются по разному, в зависимости от числа частиц в цепочке. При $n = 100$ значения усредняются 60 раз по начальным условиям и $3 \cdot 10^5$ раз по временному шагу. При $n = 1000$ значения усредняются 20 раз по начальным условиям и $3 \cdot 10^5$ раз по временному шагу. При $n = 10000$ значения усредняются только $3 \cdot 10^5$ раз по временному шагу. Обезразмеривание E_T происходит путем деления тепловой энергии на энергию взаимодействия D , а p_T путем деления теплового давления на $\frac{D}{a_0}$.

3.2 Потенциал взаимодействия

Введем потенциал взаимодействия между частицами цепочки

$$\Pi = \Pi_{lj} + \Pi_s \quad (4)$$

Потенциал Π_{lj} является потенциалом Леннарда-Джонса и имеет вид

$$\Pi_{lj} = D \left[\left(\frac{a_0}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{a_0}{r} \right)^6 \right] \quad (5)$$

где D - энергия взаимодействия; a_0 - длина связи; r - расстояние между частицами. Сила взаимодействия, соответствующая потенциалу Леннарда-Джонса, вычисляется по формуле

$$F_{lj} = \Pi'_{lj} = \frac{12D}{a_0} \left[\left(\frac{a_0}{r} \right)^{13} - \left(\frac{a_0}{r} \right)^7 \right] \quad (6)$$

Жесткость связи для потенциала Леннарда-Джонса [8]

$$c_l = \frac{72D}{a_0} \quad (7)$$

Для того, чтобы цепочка, помимо продольной жесткости, обладала еще и изгибной жесткостью, частицы цепочки соединяются между собой угловой пружиной, показанной на Рис. 2.

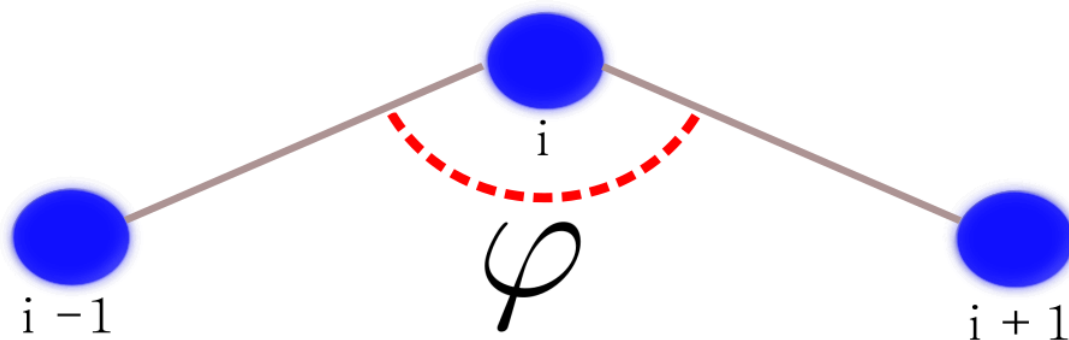


Рис. 2: Угловая пружина

Потенциал такой пружины равен

$$\Pi_s = \frac{c_s(\varphi - \pi)^2}{2} \quad (8)$$

где c_s - жесткость, φ - угол, образованный тремя частицами. Вычислим силу, соответствующую потенциалу угловой пружины. Для этого перепишем (8) в виде

$$\Pi_s = \left[\arccos \left(\frac{(\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i) \cdot (\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i)}{|\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i| |\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i|} \right) - \pi \right]^2 \cdot \frac{c_s}{2} \quad (9)$$

и обозначим

$$\zeta = \frac{(\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i) \cdot (\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i)}{|\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i| |\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i|} \quad (10)$$

тогда

$$\mathbf{F}_{i-1} = \frac{\partial \Pi_s}{\partial \mathbf{r}_{i-1}}, \quad \mathbf{F}_i = \frac{\partial \Pi_s}{\partial \mathbf{r}_i}, \quad \mathbf{F}_{i+1} = \frac{\partial \Pi_s}{\partial \mathbf{r}_{i+1}} \quad (11)$$

Подставим выражение (9) в первое уравнение из (11). Получим

$$\mathbf{F}_{i-1} = c_s \frac{\pi - \varphi}{\sqrt{1 - \zeta^2}} \frac{(\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i)}{|\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i|} \cdot \frac{\partial \frac{(\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i)}{|\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i|}}{\partial r_{i-1}} \quad (12)$$

Воспользуемся формулой

$$\frac{\partial \frac{(\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i)}{|\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i|}}{\partial r_{i-1}} = \frac{1}{|\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i|} \left(\mathbf{E} - \frac{(\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i)(\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i)}{|\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i|^2} \right) \quad (13)$$

тогда выражение для силы примет вид

$$\mathbf{F}_{i-1} = c_s \frac{\pi - \varphi}{\sqrt{1 - \zeta^2}} \frac{(\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i)}{|\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i| |\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i|} \cdot \left(\mathbf{E} - \frac{(\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i)(\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i)}{|\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i|^2} \right) \quad (14)$$

аналогично находим выражения

$$\mathbf{F}_{i+1} = c_s \frac{\pi - \varphi}{\sqrt{1 - \zeta^2}} \frac{(\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i)}{|\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i| |\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i|} \cdot \left(\mathbf{E} - \frac{(\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i)(\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i)}{|\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i|^2} \right) \quad (15)$$

и

$$\mathbf{F}_i = -\mathbf{F}_{i-1} - \mathbf{F}_{i+1} \quad (16)$$

3.3 Периодические граничные условия

Периодические граничные условия (ПГУ) часто используются в молекулярной динамике. ПГУ необходимы для того, чтобы получить результат для бесконечного числа частиц, рассматривая конечное число частиц, находящихся в ограниченном блоке. Этот ограниченный блок периодически повторяется в положительных и отрицательных направлениях всех осей декартовой системы координат. Периодические граничные условия впервые были предложены Максом Борном и Теодором фон Карманом в 1912 [6] и более подробно описаны в [7]. Использование периодических граничных условий вызвано желанием уменьшить или полностью убрать из рассмотрения поверхностные(граничные) эффекты, так как в противном случае необходимо отдельно учитывать их вклад в результаты симуляции.

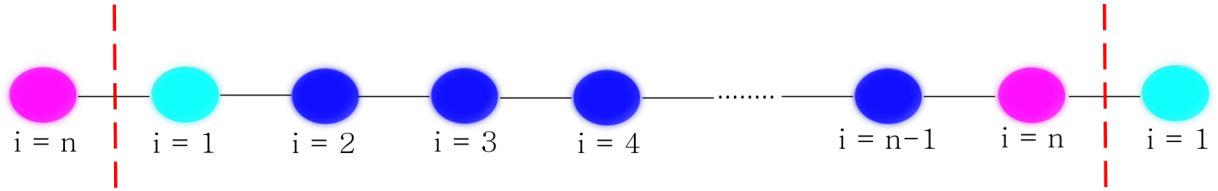


Рис. 3: Схематическое представление периодических граничных условий для цепочки

3.4 Список взаимодействующих частиц

Для увеличения скорости расчетов в программе используется список взаимодействующих частиц. Так как при написании программы ставится цель иметь возможность дальнейшего усложнения модели, в качестве списка частиц используется список Верле [9],[10]. В данной работе не исследуется процесс плавления или разрыва цепочки, поэтому для увеличения скорости расчетов список формируется на первом шаге работы программы и не меняется в процессе симуляции. Формирующийся список зависит от радиуса обрезания $a_{cut} = a$, где a - расстояние между частицами в начальный момент времени. Таким образом, только соседние частицы взаимодействуют между собой в процессе симуляции.

3.5 Модифицированный алгоритм Верле (Leapfrog)

Для численного интегрирования уравнения движения в данной работе используется модифицированный алгоритм Верле

$$\ddot{\mathbf{r}}_i = \frac{d^2\mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i \quad (17)$$

или в равносильной форме

$$\dot{\mathbf{v}}_i = \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \mathbf{F}_i, \quad \dot{\mathbf{r}}_i = \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \mathbf{v}_i \quad (18)$$

Плюс данного метода в высокой точности и стабильности, в сравнении с другими методами второго порядка, а так же то, что при интегрировании уравнений движения сохраняется энергия системы [11]. В данной работе $dt = 0.01T_*$, где T_* - период, соответствующий частоте Эйнштейна.

4 Влияние параметров цепочки на зависимость теплового давления от тепловой энергии $p_T(E_T)$

4.1 Влияние длины цепочки на $p_T(E_T)$

Необходимость исследования зависимости длины цепочки на зависимость $p_T(E_T)$ обусловлена использованием в модели периодических граничных условий. Особенность ПГУ заключается в том, что фактически рассматривая конечное число частиц цепочки, формально можно говорить о рассмотрении бесконечного числа частиц. Так как невозможно с абсолютной уверенностью утверждать, что изменение длины рассматриваемого участка цепочки не приведет к изменению количественных результатов моделирования, необходимо выяснить, в каких случаях длина цепочки оказывает влияние на результат, а в каких нет.

Для того, чтобы исследовать влияние длины цепочки на зависимость давления от температуры $p(E_T)$, рассмотрим несколько различных начальных конфигураций цепочки. Так как координаты частиц, формирующих цепочку, в начальный момент времени задаются формулой (19), то при фиксированном значении ε и a_0 изменение длины цепочки возможно только при изменении числа частиц n . Таким образом, исследование влияния длины цепочки на зависимость $p_T(E_T)$ сводится к исследованию влияния n на $p_T(E_T)$. Стоит отметить, что в формуле (19) ε - относительная деформация. Видно, что если $\varepsilon > 0$, то цепочка сжата на $100 \cdot \varepsilon\%$, если $\varepsilon < 0$, то цепочка растянута на $100 \cdot \varepsilon\%$.

$$\begin{cases} x_i = (i - \frac{n}{2} - 1)(1 - \varepsilon)a_0 \\ y_i = 0 \end{cases}, \quad \mathbf{r}_i = \mathbf{r}_i(x_i, y_i) \quad (19)$$

4.2 Влияние n на $p_T(E_T)$ при $\varepsilon = 0$

Для начала рассмотрим, как влияет число частиц на зависимость давления от температуры $p(E_T)$ при нулевой деформации. Для этого проведем моделирование системы с тремя различными значениями числа частиц. Здесь и далее каждой точке соответствует эксперимент, проведенный при фиксированном значении радиуса окружности V_{max} , внутри которой распределены начальные значения скоростей частиц $V_i, i = \overline{1, n}$.

На Рис. 4 видно, что все значения лежат на одной кривой, значит можно утверждать, что при нулевой деформации длина цепочки никак не влияет на зависимость $p_T(E_T)$.

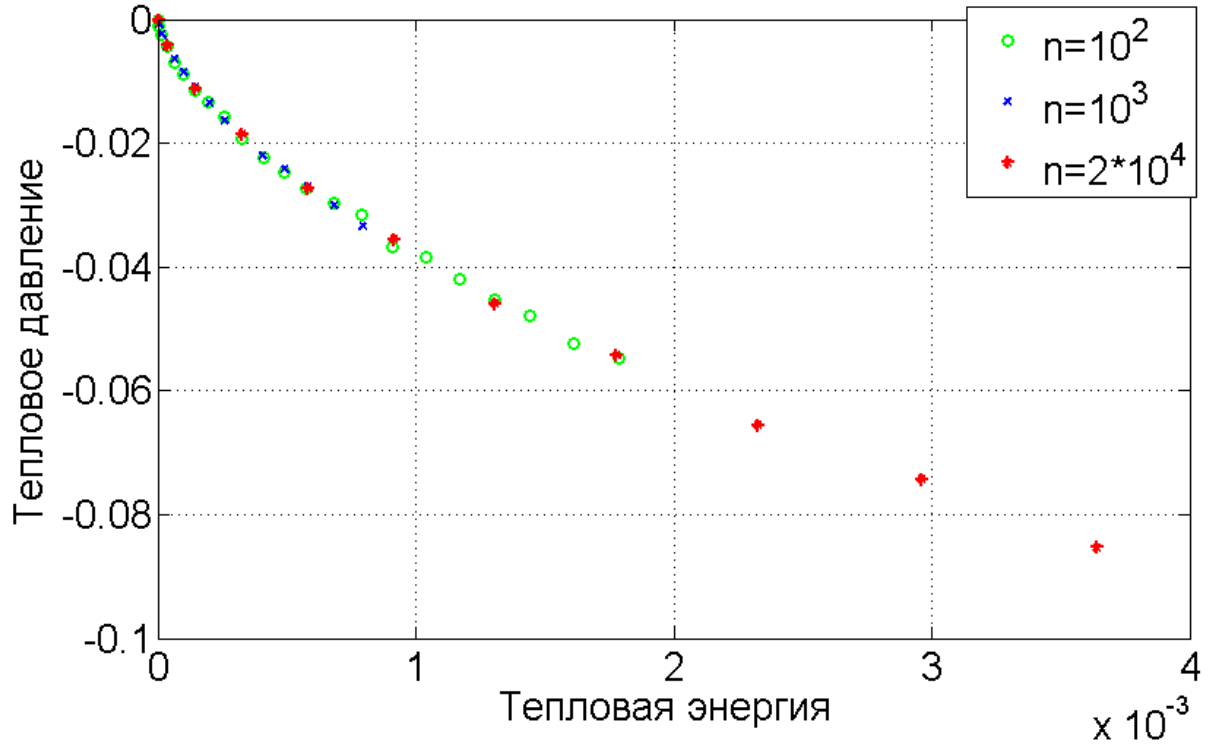


Рис. 4: Влияние n на $p_T(E_T)$ при $\varepsilon = 0$

4.3 Влияние n на $p_T(E_T)$ при растяжении

Теперь рассмотрим ситуацию, когда цепочка растянута. Возьмем значение деформации, соответствующее растяжению цепочки на 0.1%, то есть $\varepsilon = -0.001$. Для анализа сравним результаты, полученные для пяти различных значений числа частиц.

Для случая растяжения цепочки рассмотрим не 3 конфигурации, как было для случая $\varepsilon = 0$, а 5. Это вызвано тем, что исследование растяжения является одной из задач в данной работе, поэтому есть смысл сравнивать не только количественные различия в полученных результатах, но и скорость их получения. Таким образом, при одинаковости полученных результатов можно выбрать то число частиц, при котором расчет происходит быстрее всего. Стоит отметить, что скорость расчета связана со способом осреднения величин. Основное различие вызвано разной скоростью работы функций, реализованных на языке $C++$. Например, осреднение по начальным условиям проводится гораздо медленнее, чем осреднение по временному шагу.

На Рис. 5 видно, что все точки лежат на одной кривой, вследствие чего можно утверждать, что при растяжении зависимость $p_T(E_T)$ так же не зависит от числа

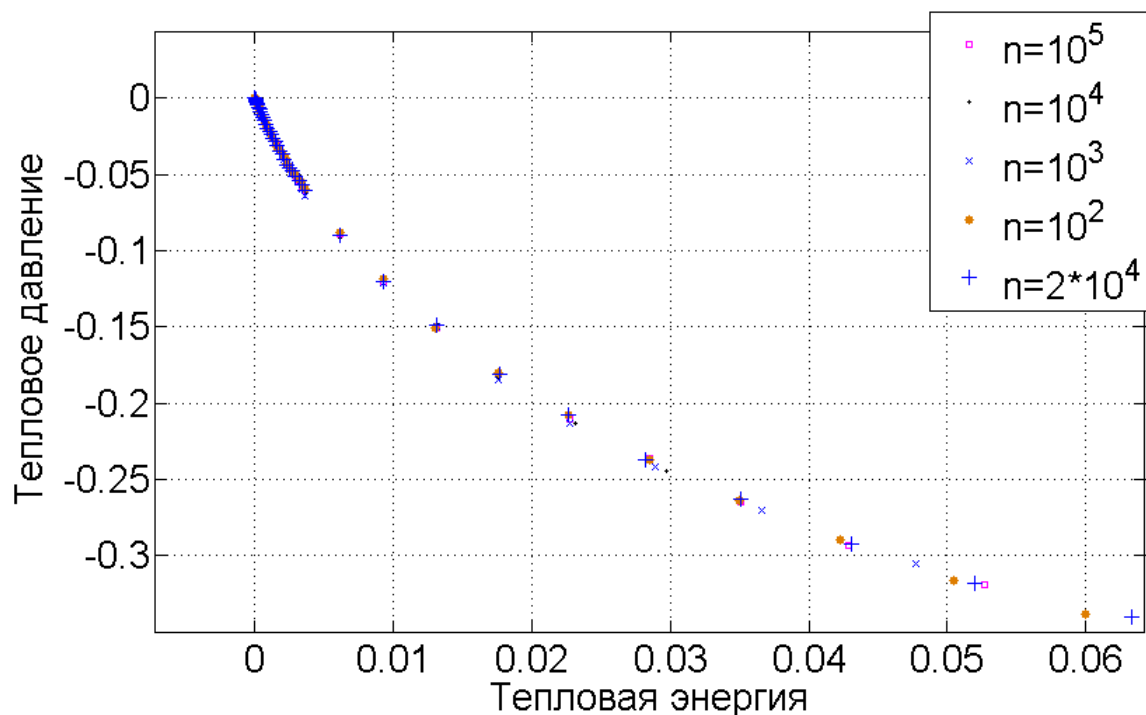


Рис. 5: Влияние n на $p(E_T)$ при $\varepsilon = -0.001$

частиц, составляющих цепочку. Наибольшая скорость расчета была достигнута при $n = 10000$, поэтому в дальнейшем при исследовании растяжения будет использоваться конфигурация с $n = 10000$.

4.4 Влияние n на $p_T(E_T)$ при сжатии

В данной работе рассматривается сжатие цепочки до и в момент потери равновесия, то есть при значениях деформации $\varepsilon \leq \varepsilon_{cr}$, где ε_{cr} - критическая деформация цепочки. Чтобы найти ε_{cr} воспользуемся формулой Эйлера для определения критической силы, вызывающей потерю устойчивости сжатого стержня

$$F_{cr} = \frac{m^2 \pi^2 EJ}{l^2} \quad (20)$$

где m - произвольное целое число (не равное нулю), которое представляет собой число полуволн синусоиды, укладываемых на длине изогнутой оси стержня, E - модуль Юнга стержня, J - момент инерции оси, относительно которой искривляется стержень, l - длина стержня. В случае цепочки $l = (n - 1)$, $EJ = c_s$ [12]. Так как в данной исследовании ставится задача рассмотрения поведения цепочки до потери равновесия, то $m = 2$. Это вызвано тем, что из-за периодических граничных условий цепочка не может потерять устойчивость при $m = 1$.

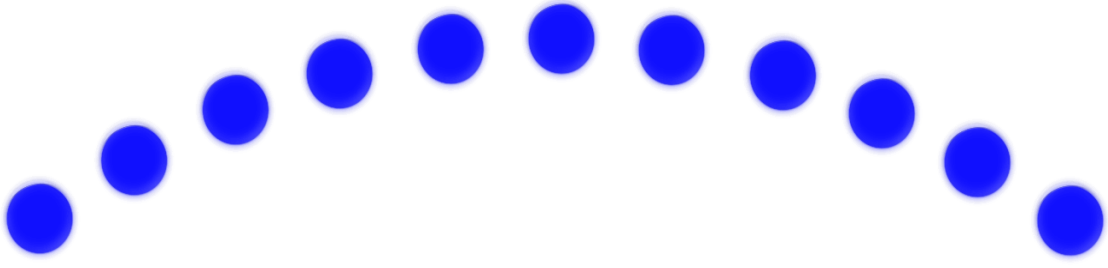


Рис. 6: Потеря устойчивости при $m = 1$

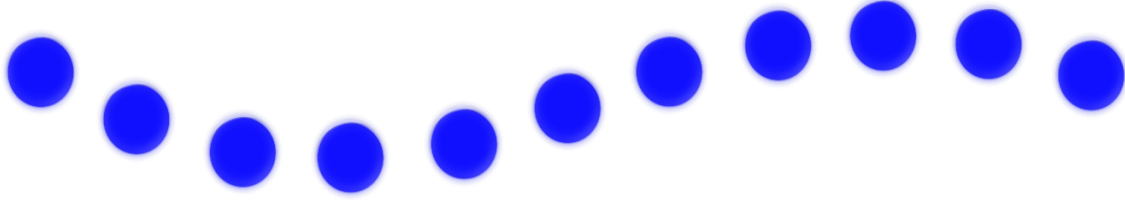


Рис. 7: Потеря устойчивости при $m = 2$

Чтобы найти критическую деформацию, необходимо поделить F_{cr} на продольную жесткость цепочки c , определяемую из соотношения

$$\frac{1}{c} = \sum_1^n \frac{1}{c_l} \Leftrightarrow c = \frac{c_l}{n} \quad (21)$$

Тогда

$$\tilde{\varepsilon}_{cr} = \frac{4\pi^2 c_s n}{(n-1)^2 c_l} \quad (22)$$

Так как в работе рассматриваются безразмерные величины, то для получения относительной деформации полученную величину необходимо разделить на длину цепочки $(n-1)$. Окончательно имеем

$$\varepsilon_{cr} = \frac{4\pi^2 c_s n}{(n-1)^3 c_l} \quad (23)$$

Из формулы (23) видно, что цепочка будет терять устойчивость по-разному, в зависимости от n . Таким образом, при сжатии цепочки нельзя говорить о независимости рассчитываемых параметров модели от длины цепочки.

4.5 Влияние жесткости цепочки на на $p_T(E_T)$

Рассмотрим, как влияет на зависимость $p_T(E_T)$ отношение $\frac{c_s}{c_l}$. Для этого при $\varepsilon = 0$ и $c_l = \frac{72D}{a_0}$ проведем серию численных экспериментов, отличающихся друг от друга значением c_s .

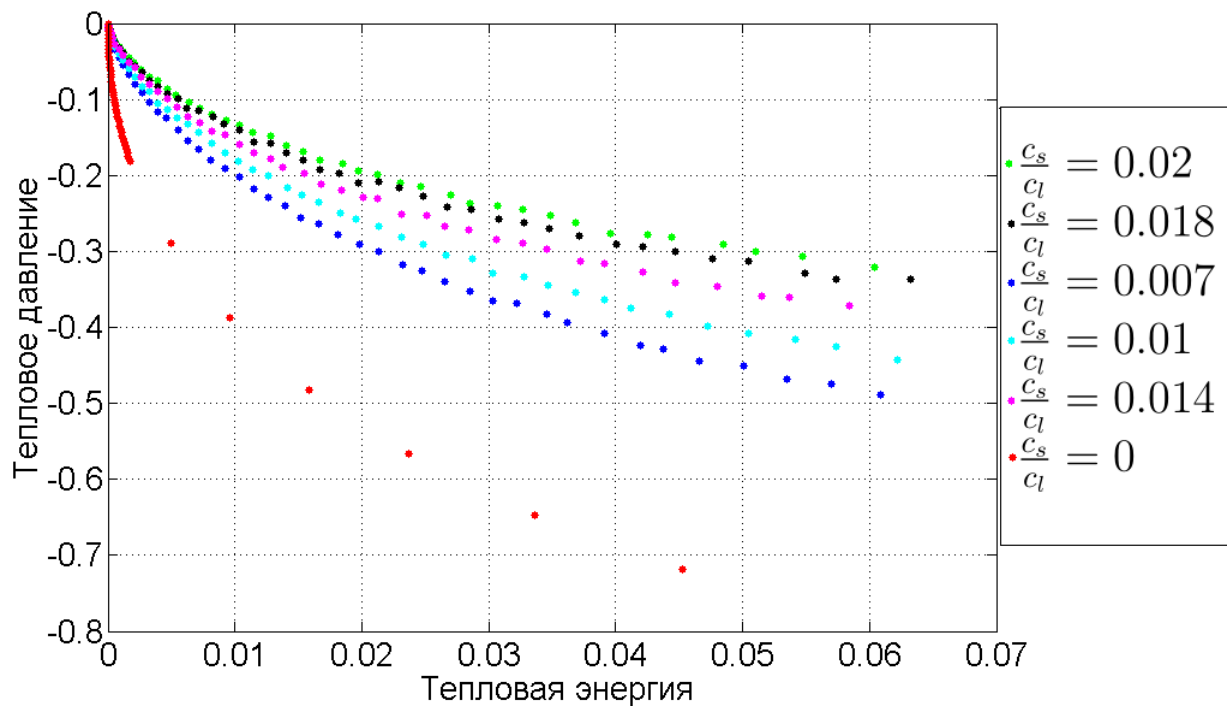


Рис. 8: Влияние отношения $\frac{c_s}{c_l}$ на $p_T(E_T)$

На Рис.8 видно, что при увеличении c_s график зависимости $p_T(E_T)$ приобретает более пологий вид, при этом качественно форма зависимости не изменяется. Таким образом можно утверждать, что увеличение жесткости угловой пружины приводит к тому, что график зависимости $p_T(E_T)$ меняет крутизну, но не меняет вид. То есть если при каких-то параметрах системы значения p_T монотонно убывают с увеличением E_T , то при изменении жесткости угловой пружины вид зависимости не изменится. В связи с этим можно сделать следующие предположения:

- Зависимость $p_T(E_T)$ для сжатой цепочки, обладающей изгибной жесткостью, будет схожа с зависимостью $p_T(E_T)$ для цепочки без изгибной жесткости хотя бы при малых значениях E_T
- Деформация ε_* , соответствующая нулевому тепловому расширению, будет меньше, чем для цепочки без изгибной жесткости, для которой такая деформация $\hat{\varepsilon}_* = -0.0286$.

4.6 Вывод

В данной главе был проведен анализ влияния длины и изгибной жесткости цепочки на зависимость $p_T(E_T)$. В результате показано, что в случае растяжения и отсутствия деформации результаты, полученных для различных начальных конфи-

гураций, совпадают. На основании полученных графиков можно утверждать, что для этих двух случаев длина цепочки не влияет на исследуемую зависимость. Это значит, что число частиц в цепочке для данных случаев может быть любым, но таким, чтобы скорость вычисления и точность полученных результатов были наибольшими. В случае сжатия длина рассматриваемого участка цепочки имеет важное значение, так как влияет на критическую деформацию. Поэтому в этом случае выбор числа частиц цепочки должен быть обусловлен, в первую очередь, условием хорошо наблюдаемой потерей равновесия.

5 Растяжение цепочки

Посмотрим, как влияет растяжение цепочки на зависимость $p_T(E_T)$. Для этого проведем серию экспериментов с различными значениями деформаций. Как уже было сказано ранее, рассматриваемое число частиц не влияет на результаты численного эксперимента при растяжении, поэтому будем растягивать цепочку, состоящую из 10000 частиц, так как для данного числа частиц скорость расчета наибольшая.

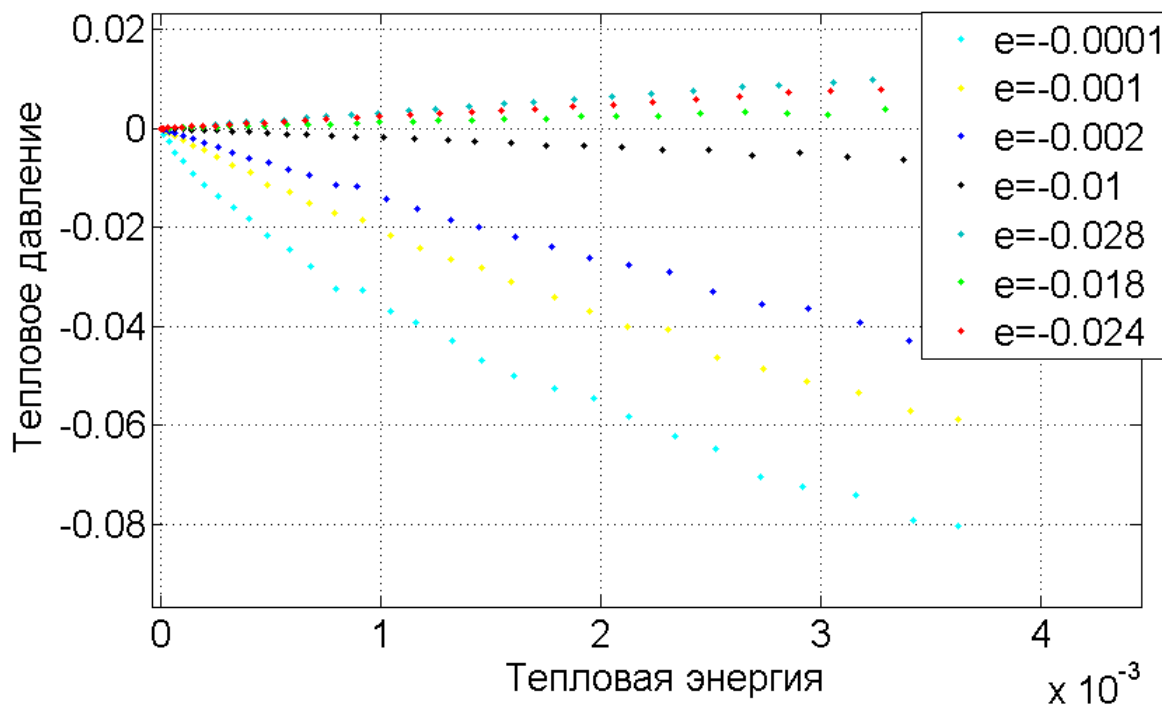


Рис. 9: Растяжение цепочки

На Рис. 9 видно, что при растяжении зависимость тепловой энергии p_T от теплового давления E_T линейна. Это означает, что в данном случае для получения зависимости $p_T(E_T)$ можно воспользоваться уравнением состояния Ми-Грюнайзена, которое для рассматриваемой цепочки будет иметь вид

$$p = p_0(a) + \frac{\Gamma(a)}{a} E_T \quad (24)$$

где Γ - коэффициент Грюнайзена. Также можно наблюдать, что при определенных значениях деформации цепочка имеет как положительный коэффициент теплового расширения, так и отрицательный. Здесь стоит отметить, что линейность зависимости p_T от E_T показана только в случаях, когда деформация цепочки не совпадает с деформацией ε_* , при которой реализуется случай нулевого теплового расширения.

Рассмотрим более подробно поведение цепочки при растяжении от 1% до 1.8%. При значениях деформации $\varepsilon \in [-0.01, -0.018]$ наблюдается переход от отрицательного теплового расширения к положительному, а так же при одном из этих значений реализуется ситуация нулевого теплового расширения. Так как для данной модели из-за нецентральности сил сложно составить аналитическое решение, для нахождения ε_* необходимо провести серию численных экспериментов при растяжении цепочки от 1% до 1.8%. В результате численного моделирования было получено, что $\varepsilon_* \approx -0.0141$, что соответствует растяжению цепочки на 1.41%. На Рис. 10 видно,

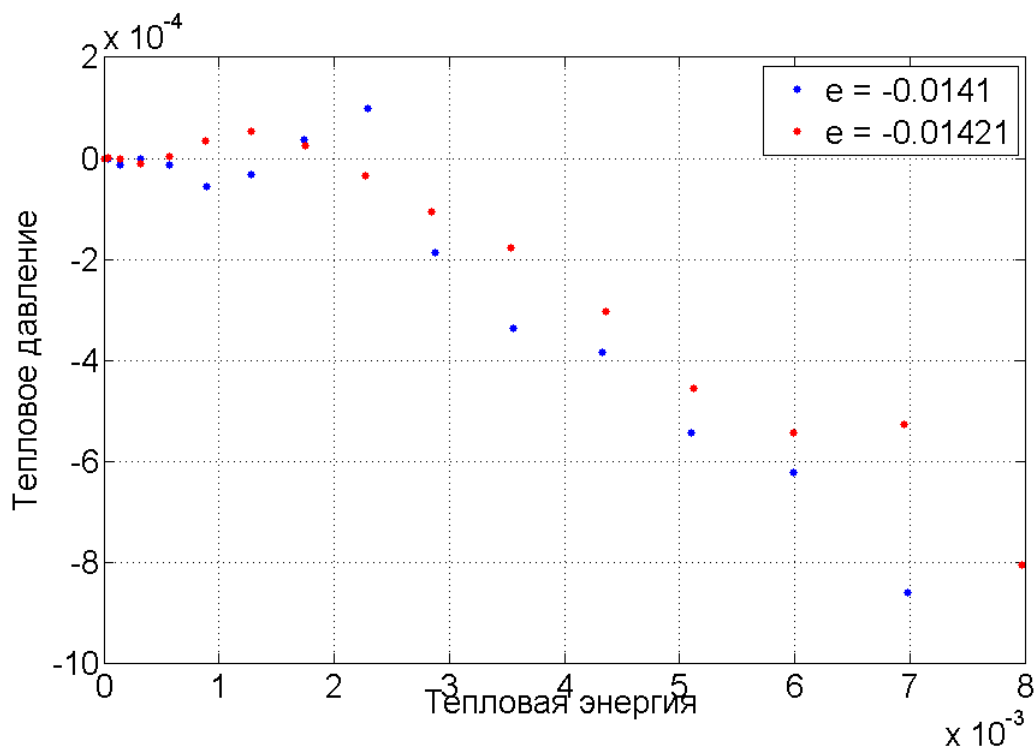


Рис. 10: Растяжение цепочки при $\varepsilon_* \approx -0.0141$

что при значениях $\varepsilon_* \approx -0.0141$ зависимость $p_T(E_T)$ не только не линейна, но и не монотонна при значениях $E_T < 10^{-3}$. Такой же эффект можно наблюдать и для цепочки без изгибной жесткости.

6 Сжатие цепочки

В работе ставится задача исследовать свойства системы при деформациях, близких к критической. Как было показано ранее, критическая деформация зависит от числа частиц в цепочке. Формула давления, соответствующего критической деформации, имеет вид

$$p_{cr} = \frac{4\pi^2 c_s}{(n-1)^2} \quad (25)$$

Рассмотрим цепочку, состоящую из 100 частиц и убедимся, что формулы (23) и (25) дают правильный результат. Для 100 частиц получим значения

$$p_{cr} = \frac{4\pi^2}{(99)^2} = 0.00402, \quad \varepsilon_{cr} = \frac{400\pi^2}{(99)^3 \cdot 72} = 5.65 \cdot 10^{-5} \quad (26)$$

Для того, чтобы получить экспериментальные значения необходимо провести следу-

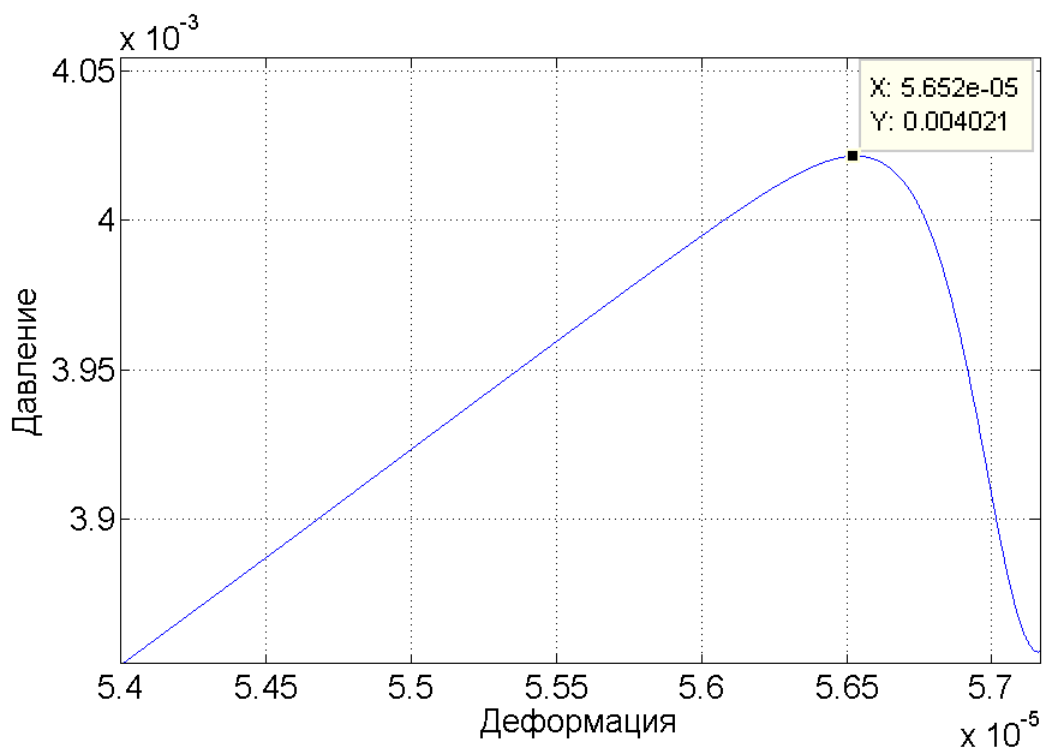


Рис. 11: Точка потери устойчивости

ющий эксперимент: недеформированную цепочку, состоящую из 100 частиц, сжать на малую величину $\Delta\varepsilon$ и измерить давление. Далее необходимо продолжить сжимать цепочку на величину $\Delta\varepsilon$ и измерять давление до тех пор, пока оно не начнет резко падать. Точка экстремума полученной зависимости давления от деформации и будет искомой.

На рис. 11 видно, что значения, полученные в результате эксперимента, отличаются от значений, полученных аналитически, менее чем на 1%. Уменьшить ошибку можно уменьшая значение $\Delta\varepsilon$. В данном случае необходимости в этом нет, так как результаты совпали достаточно, чтобы можно было утверждать, что цепочка, состоящая из 100 частиц теряет устойчивость при $m = 2$ со значением критической деформации $\varepsilon_{cr} = 5.65 \cdot 10^{-5}$.

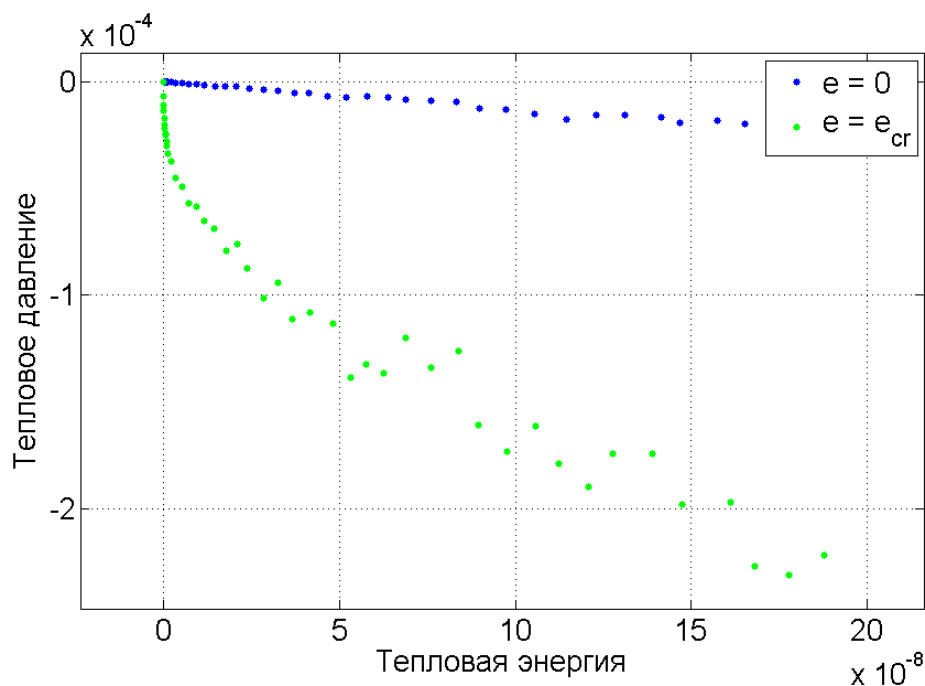


Рис. 12: Сравнение зависимости $p_T(E_T)$ при нулевой и критической деформации

Рассмотрим график зависимости $p_T(E_T)$ в случае критического сжатия и сравним с графиком, полученным для недеформированной цепочки. На Рис. 12 видно, что в случае критической деформации зависимость $p_T(E_T)$ нелинейна при малых значениях E_T , тогда как в случае нулевой деформации данная зависимость является линейной. Таким образом, в случае критического сжатия цепочки нельзя пользоваться уравнением состояния Ми-Грюнайзена для описания зависимости $p_T(E_T)$ даже при малых энергиях, так как данное уравнение предполагает линейную зависимость теплового давления от тепловой энергии. Таким образом можно сделать вывод, что для цепочки, обладающей продольной и изгибной жесткостью, параметр Грюнайзена $\Gamma = -\infty$ в случае критической деформации, а не в случае нулевой деформации, как было для цепочки, обладающей только продольной жесткостью [5]. Данный вывод хорошо согласуется с результатом анализа влияния изгибной жесткости на зависимость $p_T(E_T)$ и подтверждает сделанное в п.(4.5) предположение. Из представленных на Рис. 12 результатов можно сделать вывод, что при критической

деформации p_T зависит от $\sqrt{E_T}$. Для проверки данного предположения необходимо рассмотрим зависимость $p_T(\sqrt{E_T})$ при критическом сжатии.

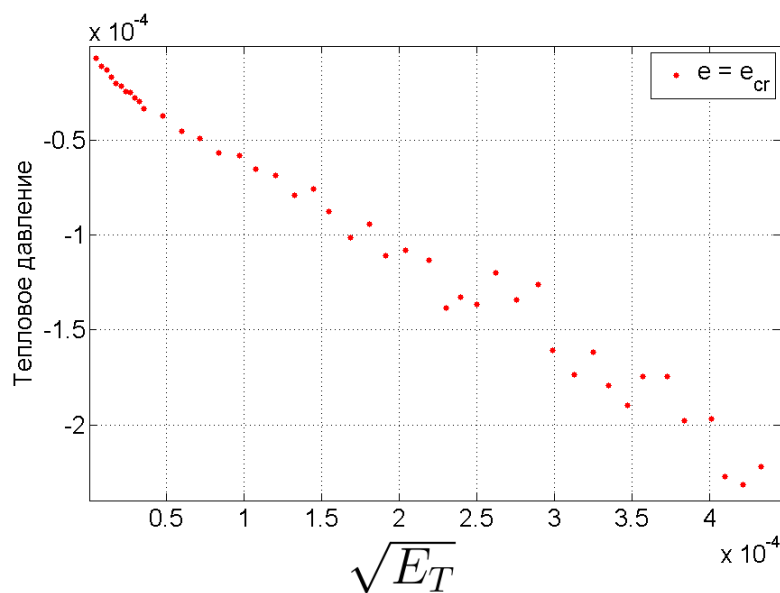


Рис. 13: $p_T(\sqrt{E_T})$ при критической деформации

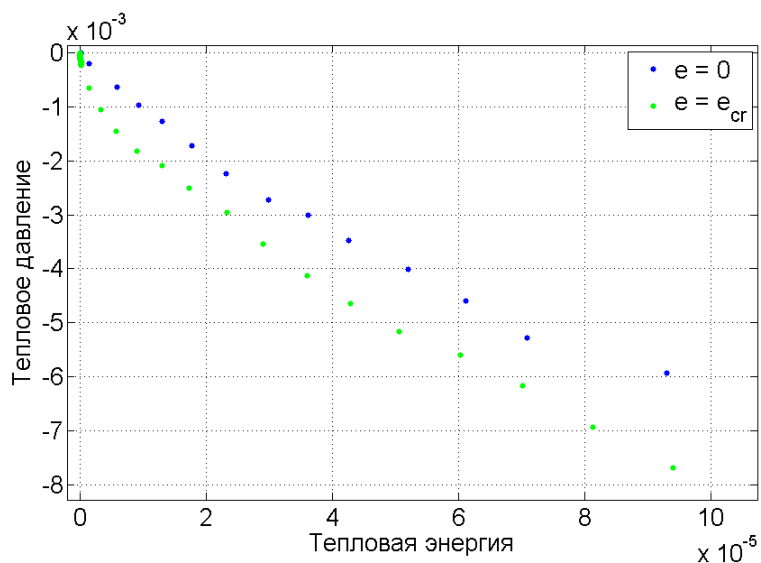


Рис. 14: $p_T(E_T)$ при нулевой и критической деформации

На Рис. 13 представлена зависимость $p_T(\sqrt{E_T})$ при критическом сжатии цепочки. Видно, что данная зависимость линейна, что позволяет утверждать, что зависимость теплового давления от тепловой энергии линейна при малых значениях тепловой энергии, однако при значениях тепловой энергии порядка 10^{-4} зависимость теплового давления от тепловой энергии снова становится линейной, что видно на Рис. 14. Таким образом можно заключить, что в случае критической деформации

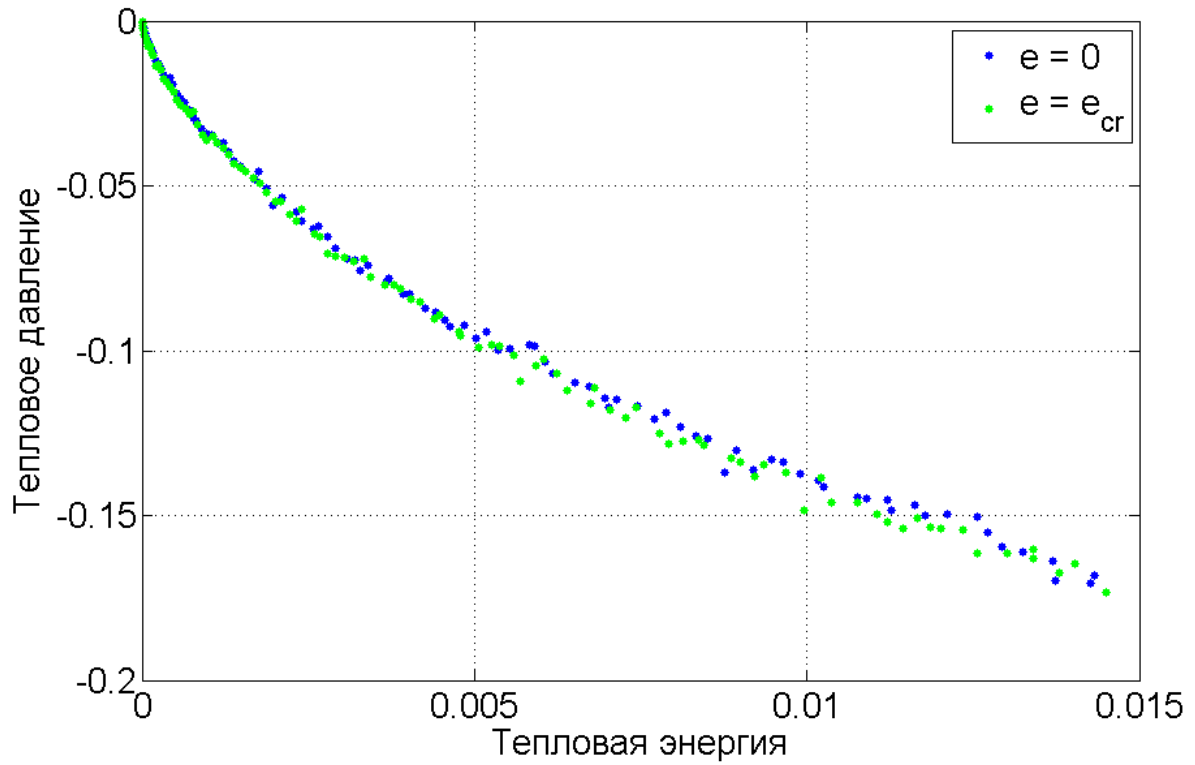


Рис. 15: Сжатие при больших значениях E_T

и значений тепловой энергии порядка 10^{-8} наблюдается зависимость $p_T(\sqrt{E_T})$, а не $p_T(E_T)$.

Рассмотрим зависимость $p_T(E_T)$ при больших значениях тепловой энергии. На Рис. 15 видно, что вид зависимости $p_T(E_T)$ при критической деформации совпадает с видом зависимости для нулевой деформации, несмотря на то, что при малых значениях E_T данные зависимости отличаются друг от друга наличием сильной нелинейности для $\varepsilon = \varepsilon_{cr}$.

7 Заключение

В данной работе численно исследовано тепловое расширение цепочки, обладающей продольной и изгибной жесткостью. Для численного моделирования методом динамики частиц написана программа на языке $C++$. Программа имеет все модули для того, чтобы обеспечить возможность добавления в модель новых параметров, не прибегая к сложным функциям языка. В процессе исследования было проанализировано несколько различных конфигураций цепочки, отличающихся друг от друга как видом деформации, так и значениями тепловой энергии. В результате анализа полученных данных можно сделать следующие выводы:

- Наличие изгибной жесткости не меняет характер зависимости $p_T(E_T)$, но меняет наклон графика, а так же наклон касательной в точке, в которой $E_T \rightarrow 0$. При увеличении изгибной жесткости угол между касательной и осью абсцисс уменьшается.
- При деформации $\varepsilon \leq 0$, т.е при растяжении или отсутствии деформации, зависимость $p_T(E_T)$ не зависит от длины рассматриваемого участка цепи.
- Зависимость $p_T(E_T)$ при растяжении цепочки линейна при значениях деформации $\varepsilon \neq \varepsilon_*$.
- Характер теплового расширения меняется при $\varepsilon \approx \varepsilon_* \approx -0.0141$. При данном значении деформации реализуется ситуация нулевого теплового расширения.
- При $\varepsilon \approx \varepsilon_* \approx -0.0141$ зависимость $p_T(E_T)$ не только не линейна, но и не монотонна.
- При деформации $0 < \varepsilon \leq \varepsilon_{cr}$, то есть при сжатии цепочки, наблюдается изменение формы зависимости $p_T(E_T)$ с линейной на сильно нелинейную при малых значениях E_T . Это приводит к тому, что $\Gamma = -\infty$ для случая критического сжатия цепочки.
- Предположение о том, что при критическом сжатии цепочки зависимость $p_T(E_T)$ сильно нелинейна, подтвердилось. Таким образом, можно ожидать, что данный эффект можно также наблюдать в графеновых нанотрубках или в графеновых листах при давлении, близкому к критическому.
- Все свойства, которыми обладала цепочка без изгибной жесткости, наблюдаются и в данной модели. Это означает, что наличие изгибной жесткости приводит к изменению количественных параметров системы, например таких как ε_* и ε_{cr} , но при этом характер зависимости $p_T(E_T)$ существенно не меняется.

Список литературы

- [1] K. Rottiger, A. Endriss, Jorg Ihringer, S. Doyle, W.F. Kuhs. «Lattice constants and thermal expansion of H_2O and D_2O Ice Ih between 10 and 265 K», Addendum, Acta Crystallographica Section B, Structural Science
- [2] Joseph N. Grima, Victor Zammit and Ruben Gatt. «Negative Thermal Expansion», Msida MSD 06, Malta.
- [3] John S. O. Evans. «Negative thermal expansion materials», Journal of the Chemical Society, Dalton Transactions, Issue 19, 1999
- [4] P.R.L. Welche, V. Heine M.T. Dove. «Negative thermal expansion in beta-quartz», Phys Chem Minerals (1998)
- [5] Kuzkin V.A., Krivtsov A.M. «Nonlinear positive/negative thermal expansion and equations of state of a chain with longitudinal and transverse vibrations», 2015.
- [6] M. Born, Th. von Karman. «Uber Schwingungen in Raumgittern», Physikzeitschrift, 13:297-309, 1912
- [7] M.P. Allen, D.J. Tildesley. «Computer Simulation of Liquids». Oxford Science Publications, Clarendon Press, Oxford, 1987
- [8] А.М. Кривцов. «Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой». М.: Физматлит, 2007. 304 с.
- [9] Verlet L. (1967). «Computer 'experiments' on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules». Phys. Rev. 159: 98–103. doi:10.1103/physrev.159.98.
- [10] Andrew Noske «Efficient Algorithms for Molecular Dynamics Simulations and Other Dynamic Spatial Join Queries»
- [11] L. Verlet, Phys. Rev., 159 (1967).
- [12] Vitaly A. Kuzkin, Jizeng Wang «Influence of thermal motion on bending stiffness of nanoscale rod-like structures», March 18, 2008