Министерство образования и науки Российской Федерации
Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого
Институт прикладной математики и механики
Кафедра «Теоретическая Механика»

Перераспределение энергии по пространственным направлениям в кристаллах

Н. Г. Шварёв
Научный руководитель: к. ф.-м. н., доцент кафедры «Теоретическая механика» В. А. Кузькин

Введение

В связи со стремительным развитием нанотехнологий количественное описание неравновесных тепловых процессов в кристаллах является одной из актуальных проблем современной физики. Поэтому большой интерес представляют процессы, происходящие в твердых телах при переходе к состоянию термодинамического равновесия. Неравновесное состояние может быть вызвано прохождением ударных волн или быстрым лазерным воздействием. Тогда кинетические энергии теплового движения атомов в разных направлениях могут различаться.

Целью данной работы является:

1) Провести компьютерное моделирование перераспределения кинетической энергии по пространственным направлениям с помощью метода молекулярной динамики с усреднениями по реализациям;
2) Определить степень влияния нелинейности на поведение системы;
3) Выделить чисто медленный процесс из быстрого процесса с наложенной на него нелинейностью;
4) Попытаться определить форму графика медленного процесса.

Постановка задачи

- Рассматривается треугольная кристаллическая решетка;
- Используется потенциал Леннард-Джонса:

$$\Pi(r) = D\left[\left(\frac{a}{r}\right)^{12} - 2\left(\frac{a}{r}\right)^{6}\right]$$

- Начальные условия:

$$v_x \leq v_{max}, v_y = 0, u_x = 0, u_y = 0$$

Случайные начальные скорости вдоль оси X, ограниченные некоторым варьируемым максимальным значением v_{max}, нулевые начальные скорости вдоль оси Y и нулевые перемещения вдоль обеих осей.

- Периодические граничные условия Борна-Кармана.

Параметры

- Масса частицы m = 1;
- Радиус частицы a = 1;
- Жесткость связи c = 1;
- Масштаб силы $f = \frac{12D}{a}$;
- Период осцилляции $\tau_o = 2\pi\sqrt{\frac{a}{6f}}$;
- Длинноволновая скорость $v_o = \sqrt{6fa}$;
- Расчетный шаг по времени $\Delta t = \frac{\tau_o}{200}$.

Выравнивание температуры

$\hat{T}_{xx} = \frac{m<v_x^2>}{k_B}, \hat{T}_{yy} = \frac{m<v_y^2>}{k_B}$ - кинетические температуры.

Рассматриваются обезразмеренные значения температур:

$$T_{xx} = \frac{\hat{T}_{xx}}{\hat{T}_{xx}^o - \hat{T}_{yy}^o}, \qquad T_{yy} = \frac{\hat{T}_{yy}}{\hat{T}_{xx}^o - \hat{T}_{yy}^o},$$

где $\hat{T}_{xx}^o$ и $\hat{T}_{yy}^o$ значения в начальный момент времени $\hat{T}_{xx}$ и $\hat{T}_{yy}$ соответственно.

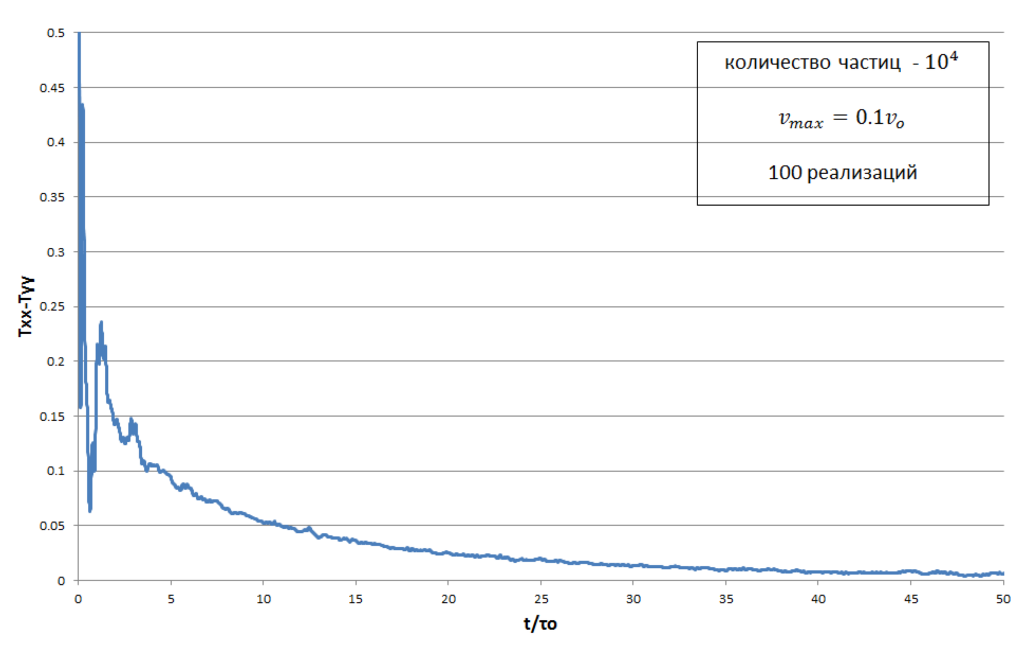
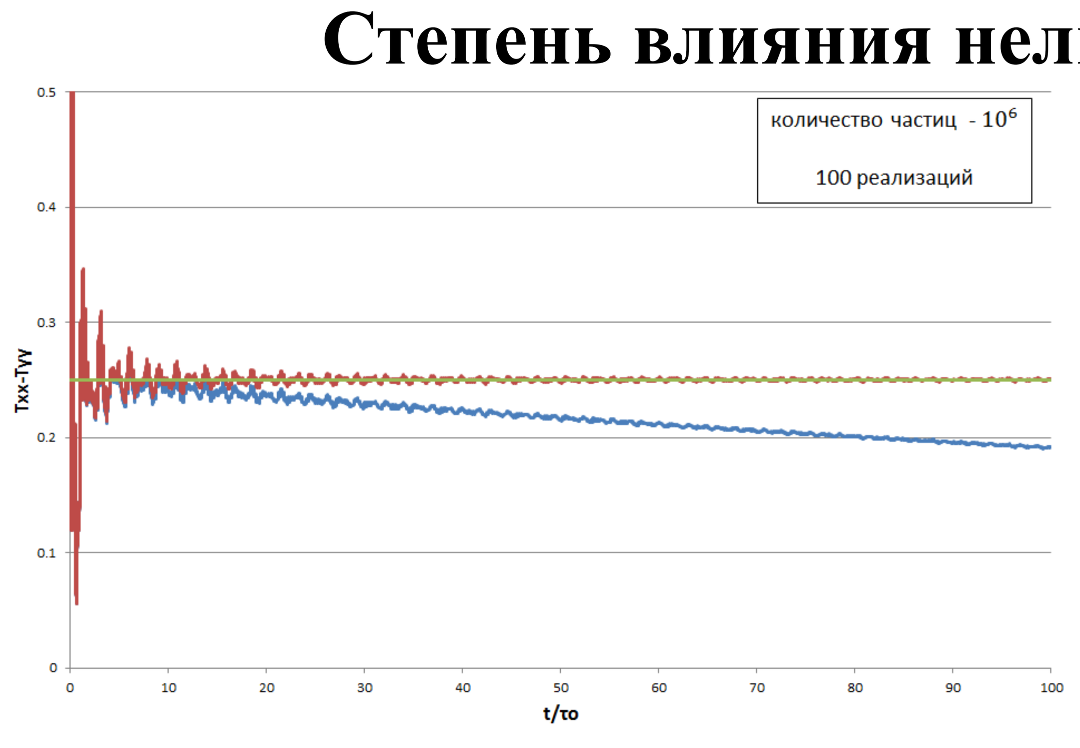


График перераспределения энергии по пространственным направлениям

Степень влияния нелинейности



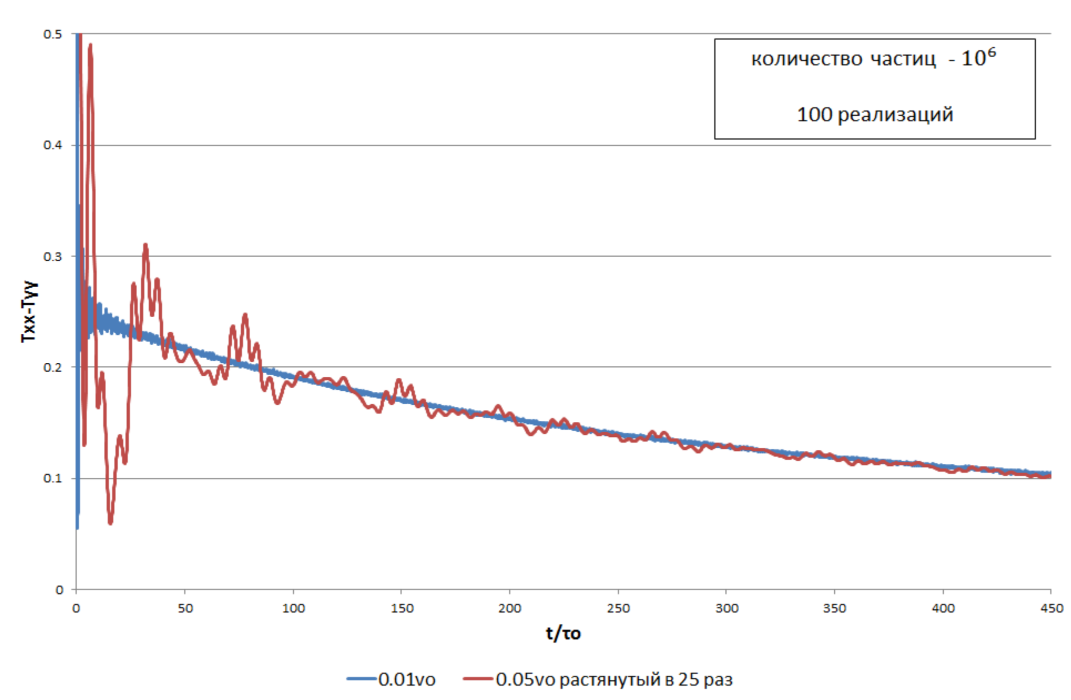
Степень влияния нелинейности

При достаточно малых скоростях тепловой процесс хорошо описывается гармонической моделью и формулой

$$\hat{T}_{xx} - \hat{T}_{yy} = \frac{1}{4}(\hat{T}_{xx}^o - \hat{T}_{yy}^o)$$

при стремлении к стационарному состоянию.

Получение формулы подобия



$\Delta T_1(t) = \Delta T_2\left(t * \left(\frac{v_{max_2}}{v_{max_1}}\right)^2\right)$ - формула подобия амплитуд начальных скоростей;

$t \geq 10\tau_o$ - оценка зоны применимости формулы.

Выделение медленного процесса и определение формы

Предположение:

$$\Delta T_{fast\&slow} = \Delta T_{fast} * \Delta T_{slow}$$

$$\downarrow \qquad \downarrow \qquad \downarrow$$

$$0 \qquad ¼ \qquad 0$$

Проверка функций вида:

$$\Delta T_{slow} = e^{a\frac{t}{\tau_o}}$$

$$\Delta T_{slow} = \left(\frac{t}{\tau_o}\right)^a$$

$$\Delta T_{slow} = \frac{1}{1 + a\left(\frac{t}{\tau_o}\right)^b}$$

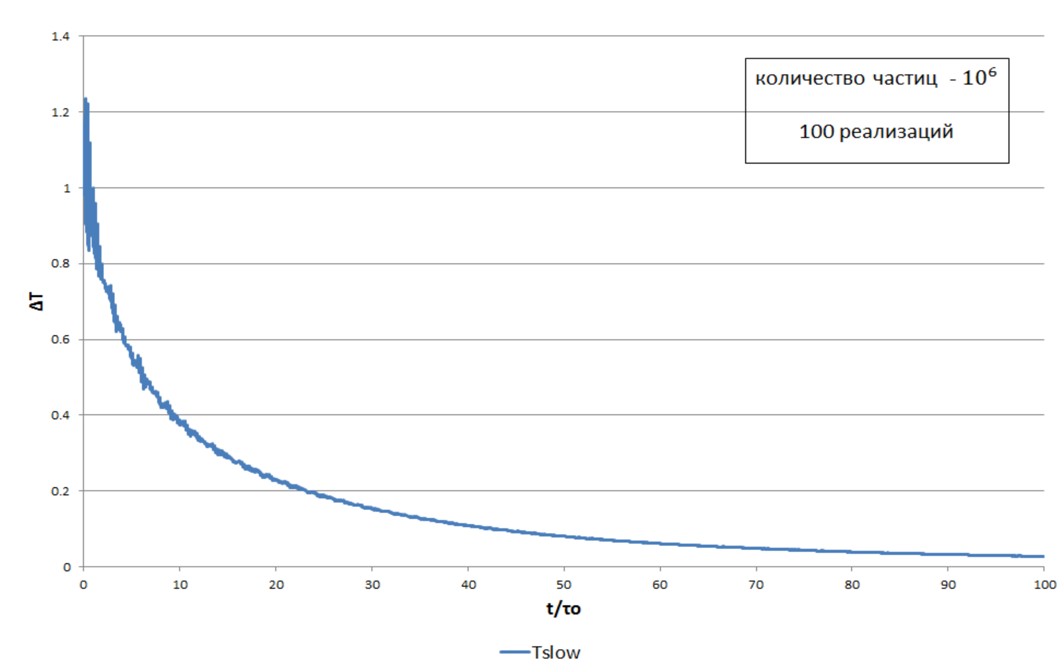
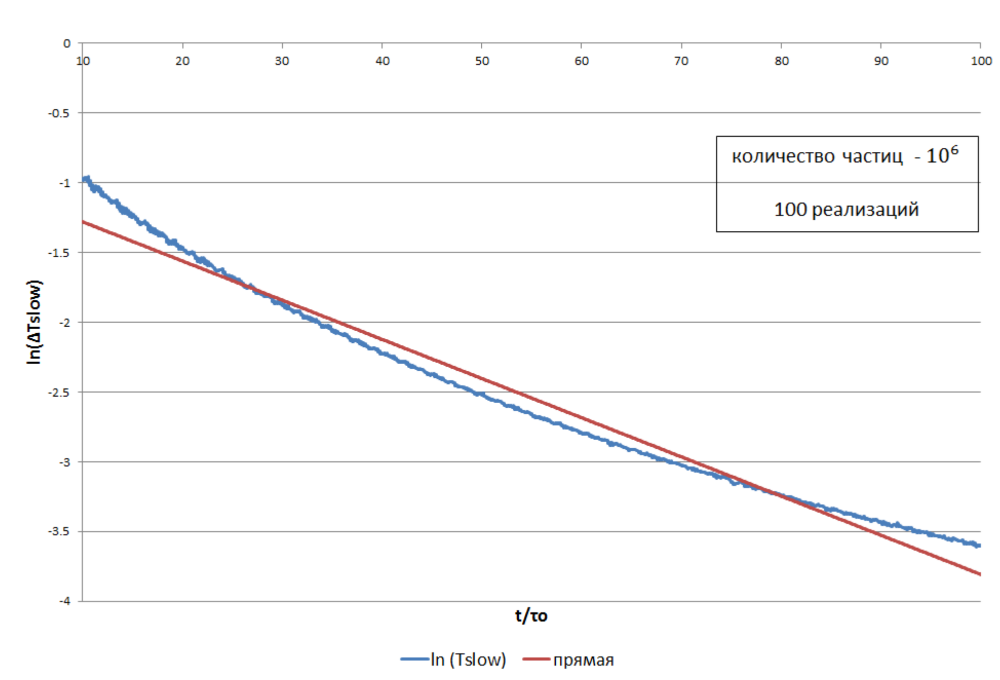
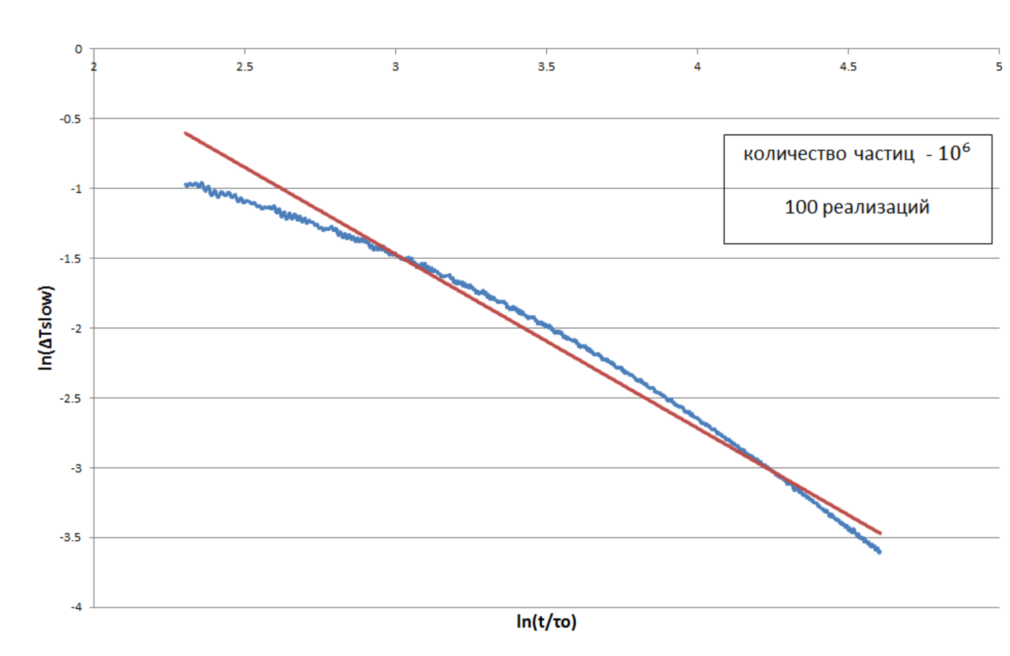


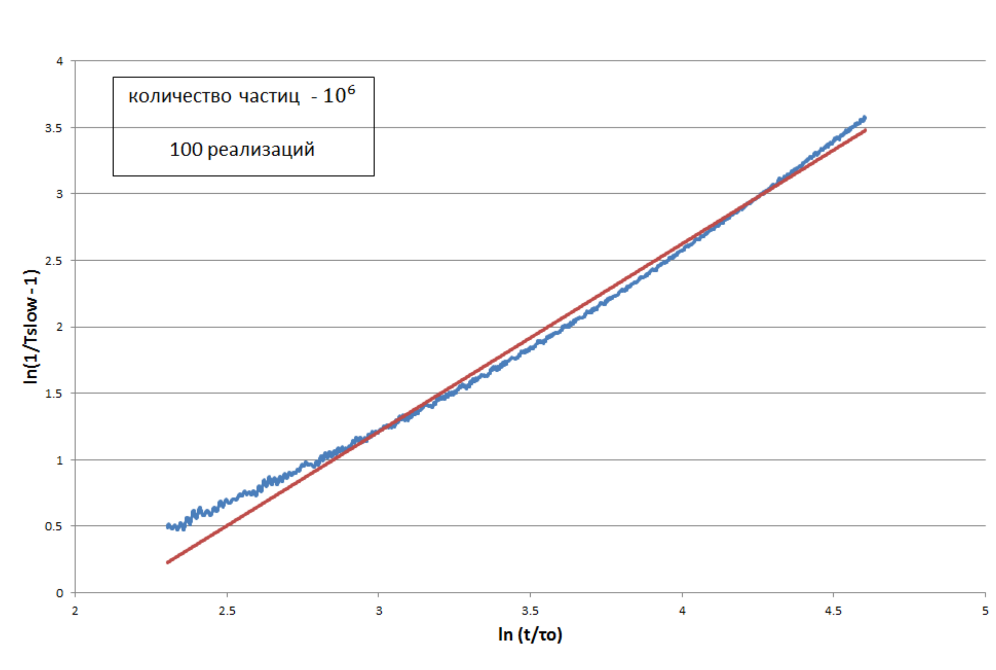
График медленного процесса



Проверка экспоненты



Проверка степенной функции



Проверка функции вида $\frac{1}{1+a\left(\frac{t}{\tau_o}\right)^b}$

Краткие выводы

- Рассмотрен процесс перераспределения кинетической энергии по пространственным направлениям.
- Рассмотрена степень влияния нелинейности
- Получена формула подобия начальных скоростей и оценена зона её применимости.
- Проведена попытка определения формы графика медленного процесса.

Санкт-Петербург
2017