Санкт-Петербургский государственный политехнический университет
Институт прикладной математики и механики,
кафедра Теоретической механики

Исследование отрицательного теплового расширения цепочки с продольной и изгибной жесткостью

Н.С. Марков, выпуск 2015 года
Научный руководитель
к. ф.-м. н., зам. зав. каф. ТМ по НИР В. А. Кузькин

Данная работа посвящена исследованию отрицательного теплового расширения цепочки, обладающей продольной и изгибной жёсткостью, частицы которой имеют две степени свободы.

- Исследовано влияние числа частиц и изгибной жёсткости на зависимость $p_T(E_T)$.
- Исследовано влияние растяжения цепочки на зависимость $p_T(E_T)$. Показано, при каких параметрах системы нельзя использовать уравнение состояния Ми-Грюнайзена.
- Исследовано влияние сжатия цепочки на зависимость $p_T(E_T)$. Получено, что при критическом сжатии данная зависимость сильно не линейна.

Обозначения

- n – число частиц в цепочке
- r_i – радиус-вектор i-ой частицы
- a_0 – равновесное расстояние между частицами
- D – энергия связи в потенциале Леннарда-Джонса
- c_l – продольная жесткость
- c_s – изгибная жесткость
- ε_{cr} – критическая деформация
- p_T – тепловое давление
- E_T – тепловая энергия
- Π – потенциал взаимодействия

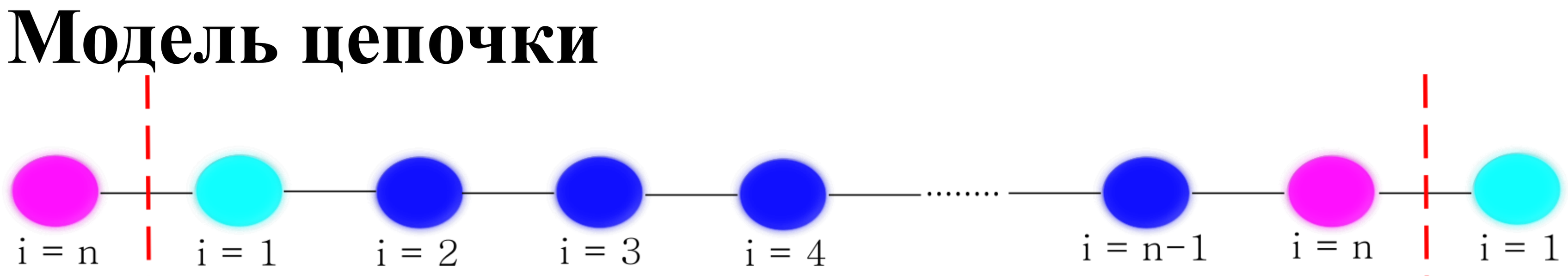
Параметры модели

$$p_T = p - p_0, \quad p = -\langle \mathbf{F_1} \rangle \cdot \mathbf{e_1}$$

Кинетическая энергия; Потенциальная энергия

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

Модель цепочки

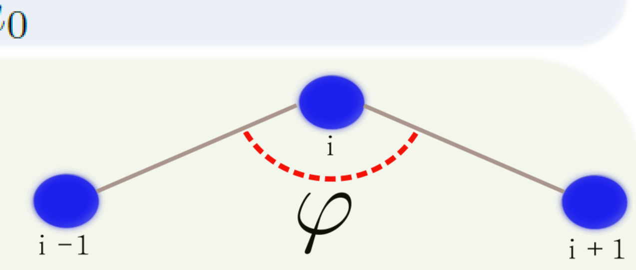


- Моделирование проводится методом динамики частиц
- Заданы периодические граничные условия
- Взаимодействуют только соседние частицы
- Для численного интегрирования уравнения движения используется модифицированный алгоритм Верле.
- Потенциал взаимодействия имеет вид: $\Pi = \Pi_{lj} + \Pi_s$

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

$$F_{lj} = \Pi'_{lj} = \frac{12D}{a_0}\left[\left(\frac{a_0}{r}\right)^{13} - \left(\frac{a_0}{r}\right)^{7}\right]; \quad c_l = \frac{72D}{a_0}$$

$$\Pi_s = \frac{c_s(\varphi - \pi)^2}{2}$$ - Потенциал угловой пружины

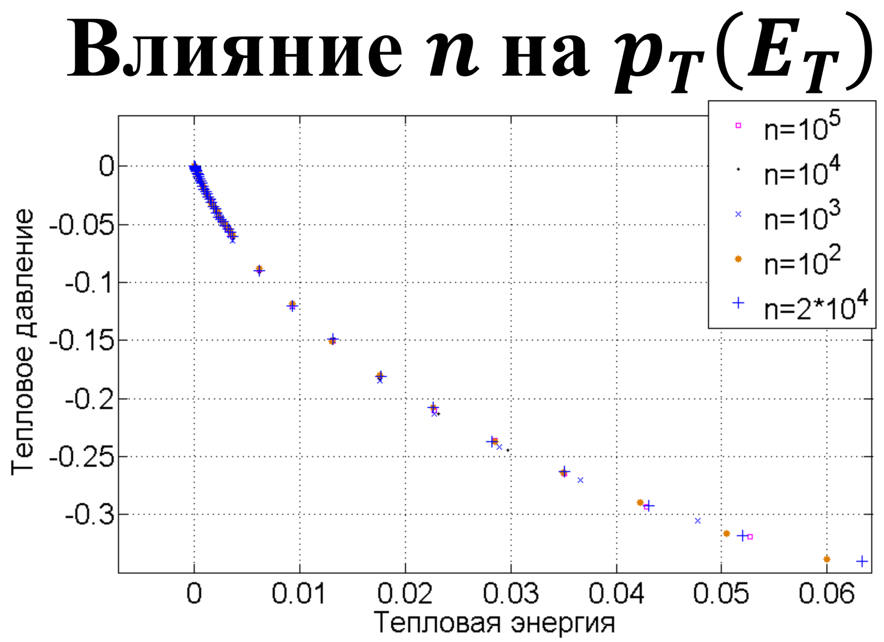


$$\mathbf{F}_{i-1} = c_s \frac{\pi - \varphi}{\sqrt{1-\zeta^2}} \frac{(\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i)}{|\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i||\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i|} \cdot \left(\mathbf{E} - \frac{(\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i)(\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i)}{|\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i|^2}\right)$$

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

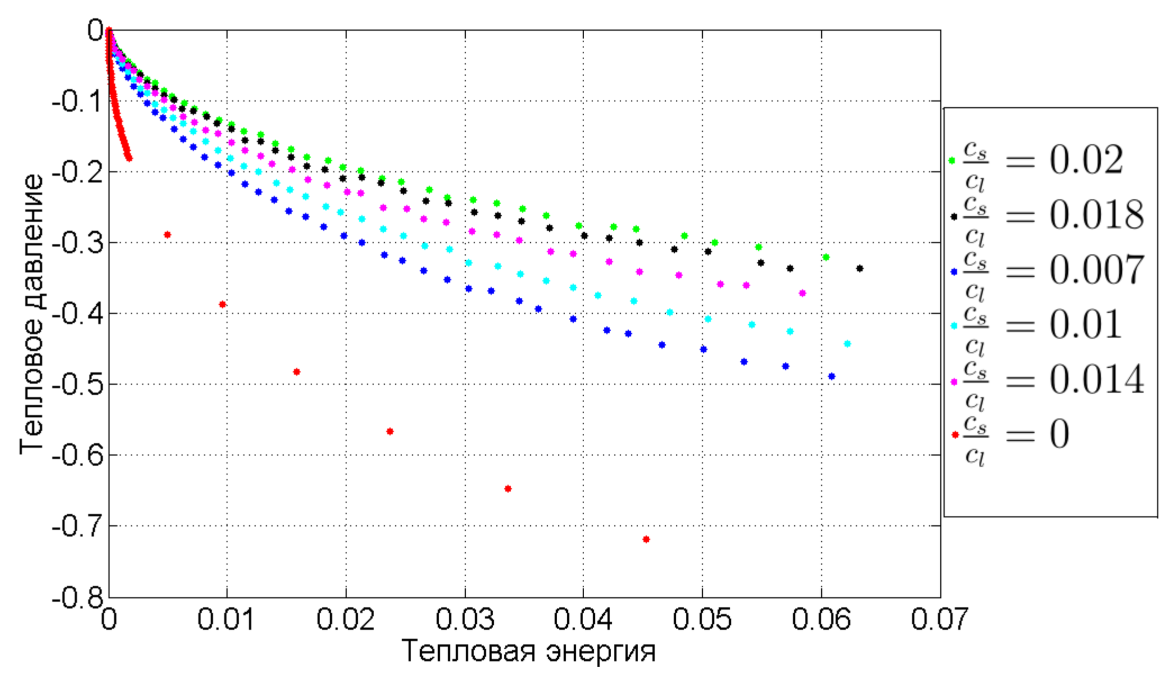
$$\mathbf{F}_i = -\mathbf{F}_{i-1} - \mathbf{F}_{i+1}; \quad \zeta = \frac{(\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i)\cdot(\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i)}{|\mathbf{r}_{i-1} - \mathbf{r}_i||\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i|}$$

Влияние n на $p_T(E_T)$ при растяжении



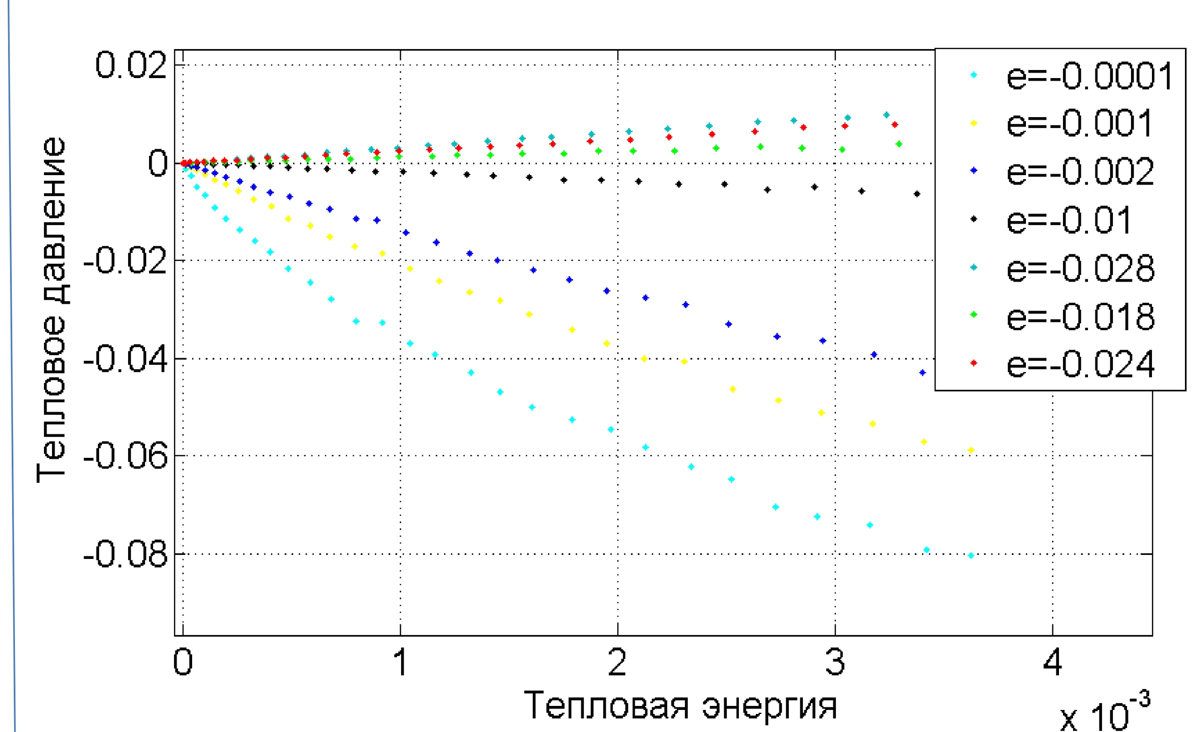
Растяжение цепочки на 0.1% для различного числа частиц. Зависимости совпали, значит при растяжении число частиц не влияет на $p_T(E_T)$. При сжатии влияет, так как критическая деформация зависит от n: $\varepsilon_{cr} = \dfrac{4\pi^2 c_s n}{(n-1)^3 c_l}$

Влияние c_s на $p_T(E_T)$



Наличие изгибной жесткости уменьшает угол между касательной к графику зависимости $p_T(E_T)$, проведенной при малых значениях E_T, и осью абсцисс

Растяжение цепочки

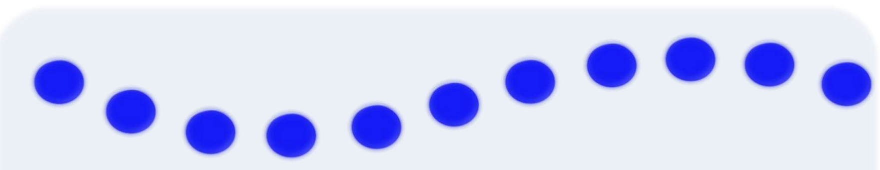


При растяжении цепочки зависимость $p_T(E_T)$ линейна. Это означает, что можно использовать уравнение Ми-Грюнайзена, но при условии, что при рассматриваемом значении растяжения не реализуется случай нулевого теплового расширения.

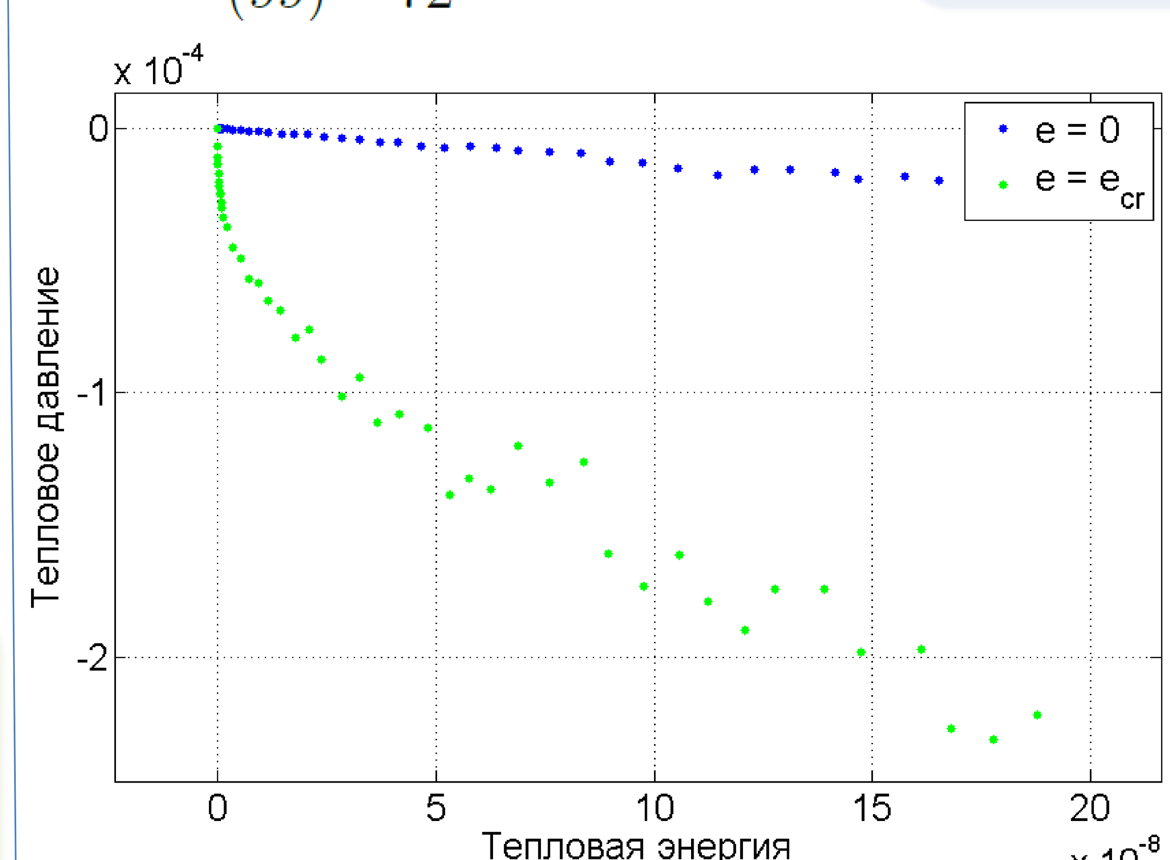
Сжатие цепочки

Рассматривается цепочка с $n = 100$. Для данного числа частиц:

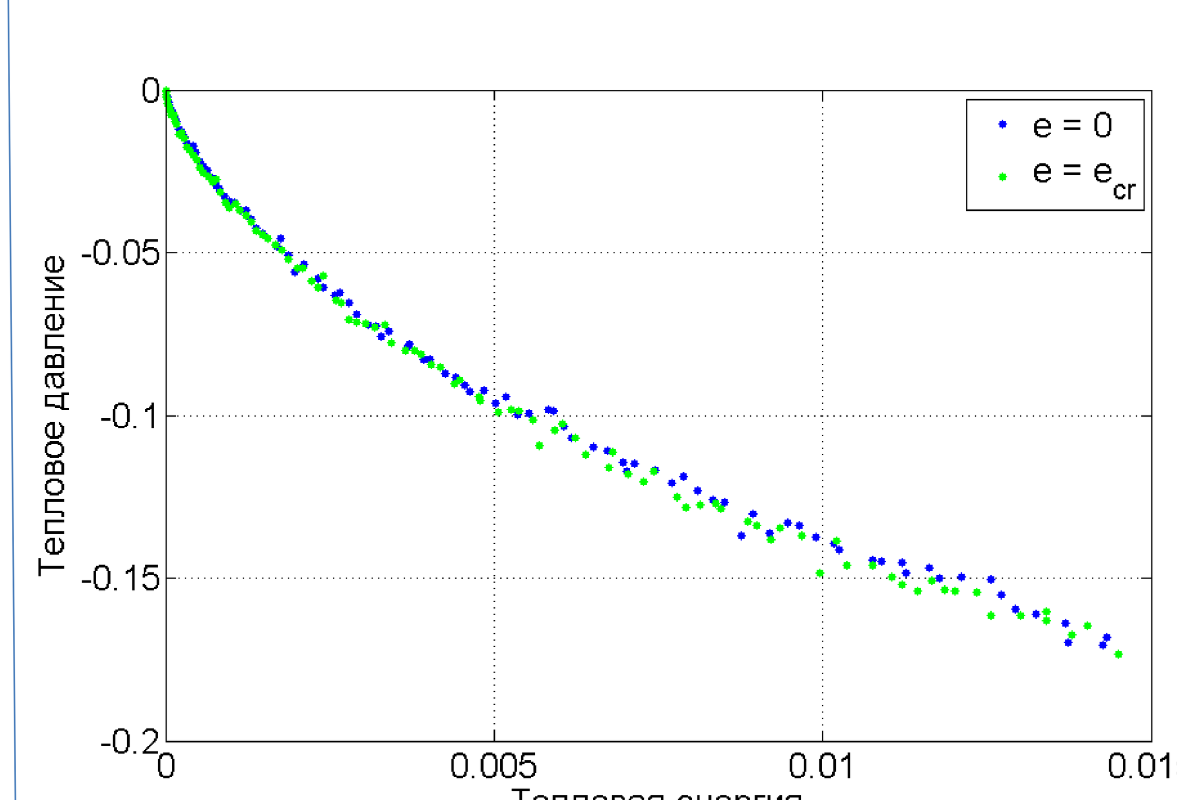
$$\varepsilon_{cr} = \frac{400\pi^2}{(99)^3 \cdot 72} = 5.65 \cdot 10^{-5}$$



Потерявшая устойчивость цепочка имеет данный вид



Зависимость $p_T(E_T)$ при критическом сжатии сильно не линейна. Уравнение Ми-Грюнайзена использовать нельзя.



При больших значениях E_T графики зависимостей $p_T(E_T)$ практически совпадают. Таким образом, влияние критической деформации заметно только при малых значениях тепловой энергии