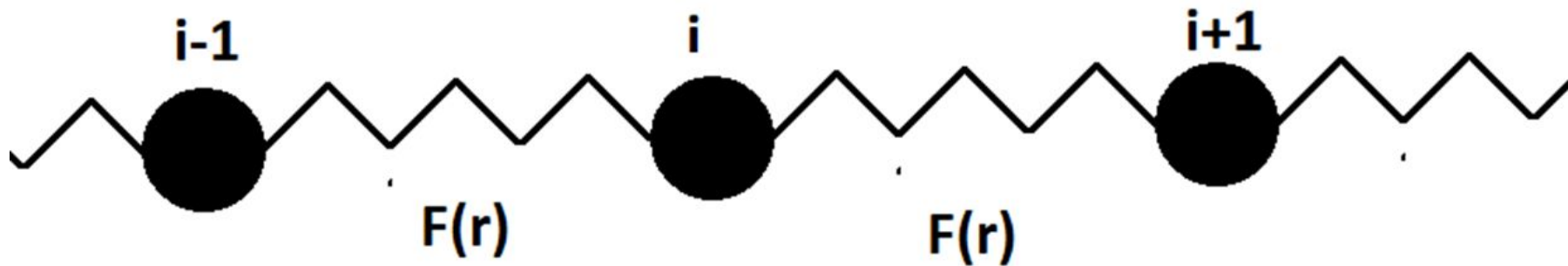


Исследование влияния разрывов связей на перенос энергии в одномерной цепочке



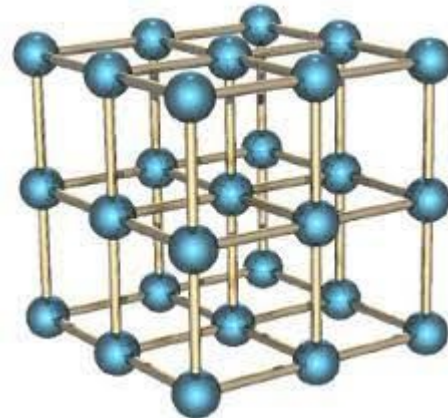
Научный руководитель: Кузькин Виталий

Андреевич

студент: Колбасов Алексей Алексеевич

Тепловые эффекты в кристаллах

1. Тепловое расширение [1]
2. Теплопроводность [2]
3. Термоэлектрический эффект [3]



[1]. Геворкян Р. Г. Курс физики: Учеб. пособие. — М.: Высш. школа, 1979 (с. 229)

[2]. Упругие и тепловые свойства идеальных кристаллов: учеб. пособие / И. Е. Беринский [и др.] ; под ред. А. М. Кривцова. - СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2009. - 144 с.

[3]. Жузе В. П., Гусенкова Е. И., Библиография по термоэлектричеству, М.— Л., 1963

Одномерный кристалл с линейным взаимодействием между ближайшими частицами. Постановка задачи

$$\ddot{u}_n = \omega^2(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1})$$

$$\dot{u}_n = p\sigma(n) \quad u_n = 0$$

$$M[p] = 0$$

$$D[p] = 1 \quad \sigma(n) = \sqrt{A + B \sin(kna)}$$

Метод интегрирования - Верле

$$v_{i+\frac{1}{2}} = v_{i-\frac{1}{2}} + \frac{F(t_i)}{m} \Delta t$$

$$x_{i+1} = x_i + v_{i+\frac{1}{2}} \Delta t$$

Локальная ошибка – $O(h^3)$

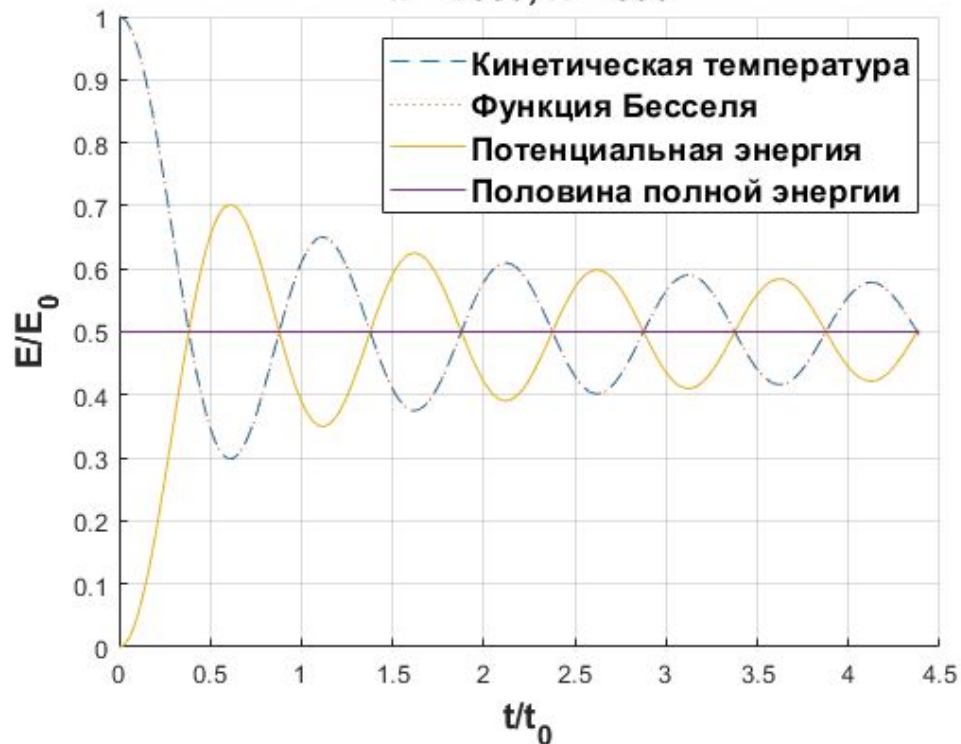
Глобальная ошибка – $O(h^2)$

$$|\det(S)| = 1$$

*расчеты при $n = 100$, $H = 800$, $dt = 0.01$
обозначены **

Изменение энергии

$n = 1000, H = 800$



$$K_J(t) = \frac{E}{2}(1 + J_0(4\omega_0 t))$$

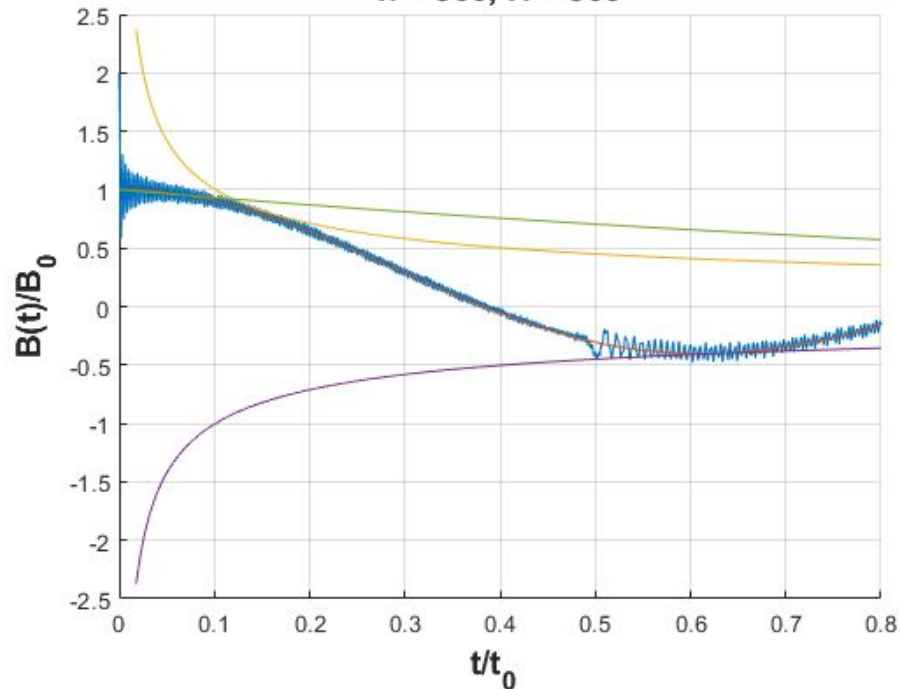
$$\omega_0 = \sqrt{C/m},$$

Сравнение уравнение теплопереноса с уравнением теплопроводности, основанном на законе Фурье, и уравнением тепловых волн [1]

	Heat equation (Fourier)	Thermal wave equation (MCV)	Equation (9) (present paper)
a)	$\dot{T} = \beta T''$	$\ddot{T} + \frac{1}{\tau} \dot{T} = \frac{\beta}{\tau} T''$	$\ddot{T} + \frac{1}{t} \dot{T} = c^2 T''$
b)	$q = -\kappa T'$	$\dot{q} + \frac{1}{\tau} q = -\frac{\kappa}{\tau} T'$	$\dot{q} + \frac{1}{t} q = -k_B \rho c^2 T'$
c)	$e^{-\beta k^2 t}$	$\approx e^{-\frac{t}{2\tau}} \cos(kct)$	$J_0(kct) \approx \frac{\cos\left(kct - \frac{\pi}{4}\right)}{\sqrt{\frac{\pi}{2} kct}}$

Сравнение полученных результатов со статьей *

n = 500, H = 800



$$T_0 = A + B \sin(kx)$$

$$: e^{-\beta k^2 t}$$

$$\pm \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{t_0}{t}}$$

$$J_0(kct)$$

Одномерный кристалл с нелинейным взаимодействием между частицами. Постановка задачи

$$\ddot{u}_n = \sum_i^N \frac{12D}{ma} \left(-\left(\frac{a}{r_{ni}}\right)^{13} + \left(\frac{a}{r_{ni}}\right)^7 \right)$$

$$r_{ni} = l + u_i - u_n, i > n$$

$$r_{ni} = l + u_n - u_i, i < n$$

$$i \neq n$$

$$u_n = 0$$

$$\dot{u}_n = p\sigma(n)$$

$$M[p] = 0$$

$$D[p] = 1$$

Укороченный потенциал

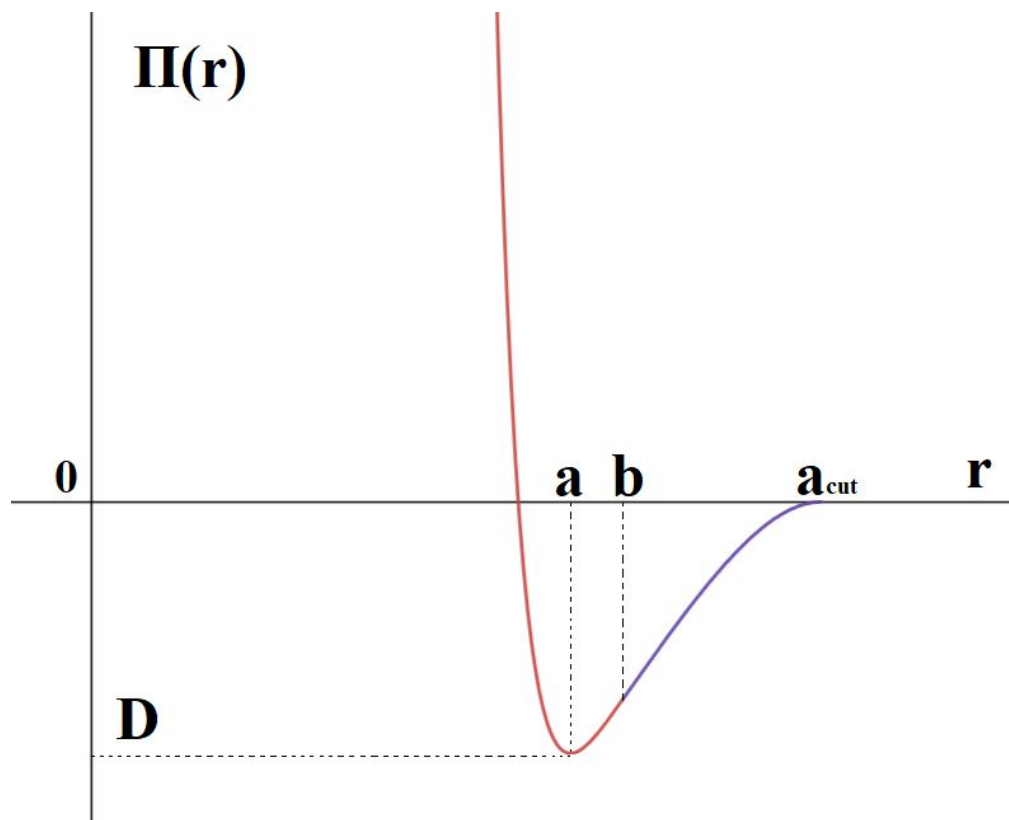
$$\tilde{\Pi}(r) = \begin{cases} \Pi(r) & \text{при } 0 < r \leq b, \\ -a_2 (a_{\text{cut}}^2 - r^2)^2 + a_3 (a_{\text{cut}}^2 - r^2)^3 & \text{при } b < r \leq a_{\text{cut}}, \\ 0 & \text{при } a_{\text{cut}} < r, \end{cases}$$

где

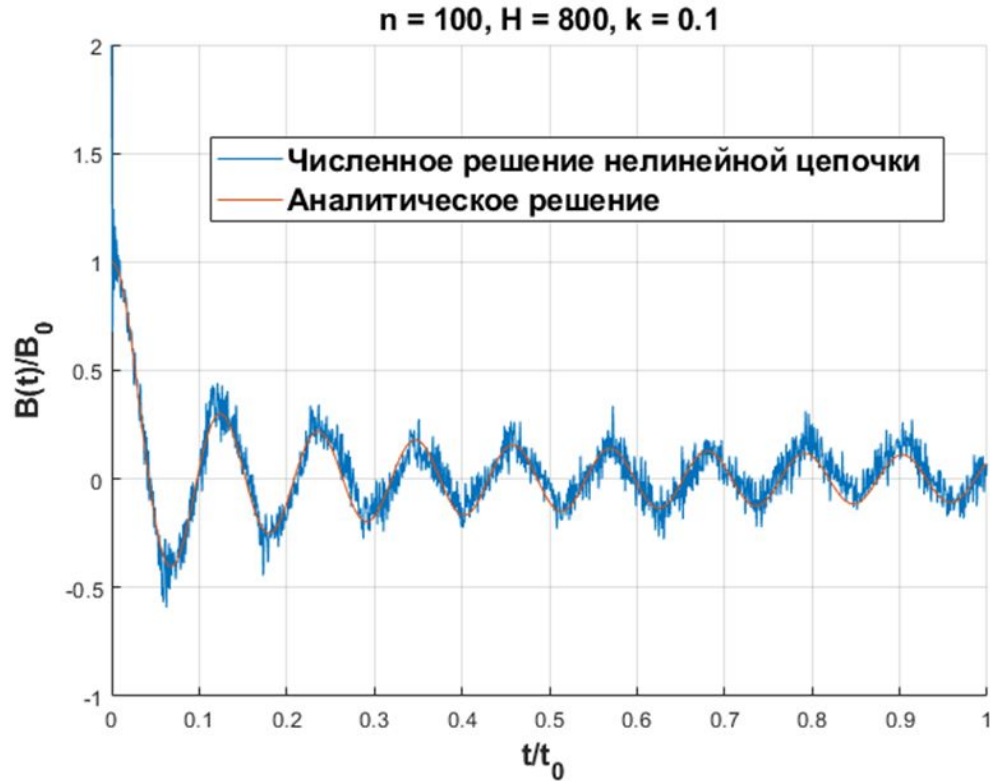
$$a_2 = \frac{5b^2 - a_{\text{cut}}^2}{8b^3 (a_{\text{cut}}^2 - b^2)} f_*, \quad a_3 = \frac{3b^2 - a_{\text{cut}}^2}{12b^3 (a_{\text{cut}}^2 - b^2)^2} f_*, \quad a_{\text{cut}}^2 = b^2 \left(5 - \sqrt{16 + \frac{24 \Pi(b)}{b f_*}} \right).$$

$$\tilde{f}(r) = \begin{cases} f(r) & \text{при } 0 < r \leq b, \\ (3a_3 (a_{\text{cut}}^2 - r^2) - 2a_2) (a_{\text{cut}}^2 - r^2)^2 & \text{при } b < r \leq a_{\text{cut}}, \\ 0 & \text{при } r > a_{\text{cut}}. \end{cases} \quad f_* = \frac{504}{169} \sqrt[6]{\frac{7}{13}} \frac{D}{a}$$

Укороченный потенциал

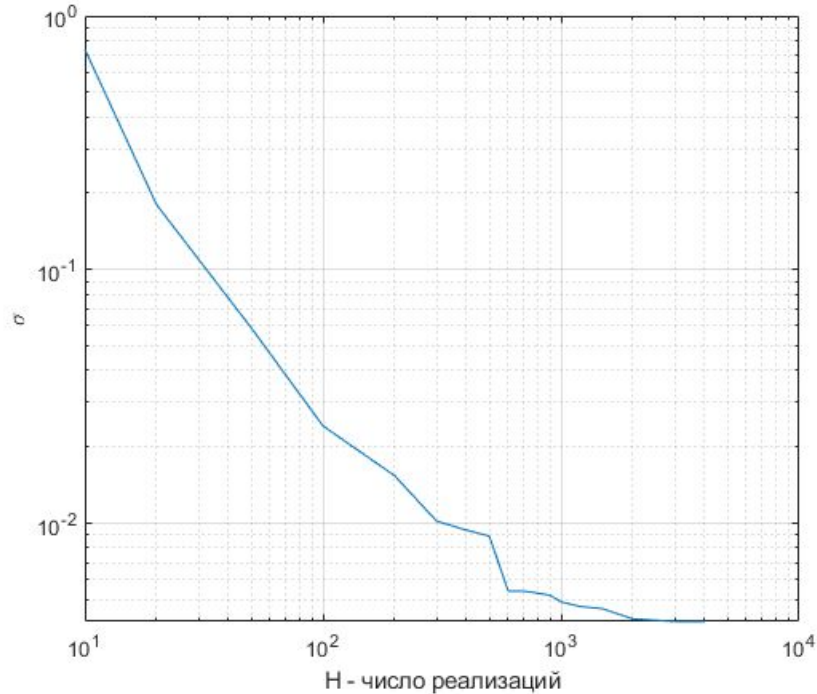


Слабая нелинейность



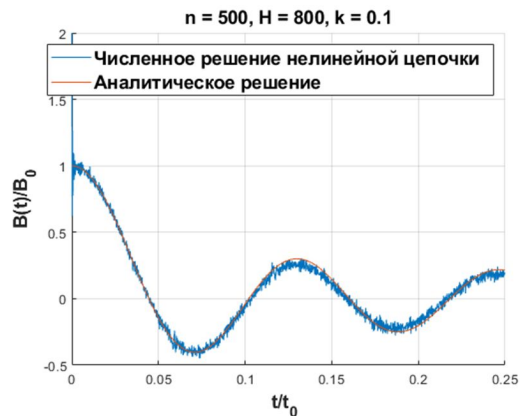
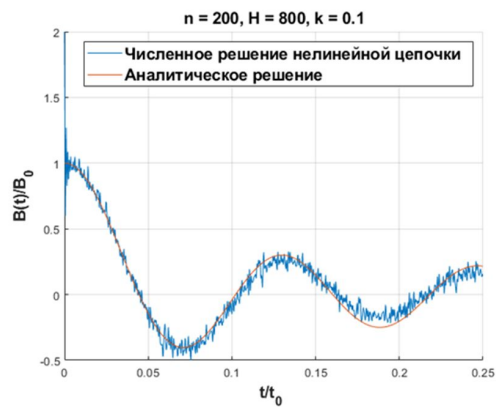
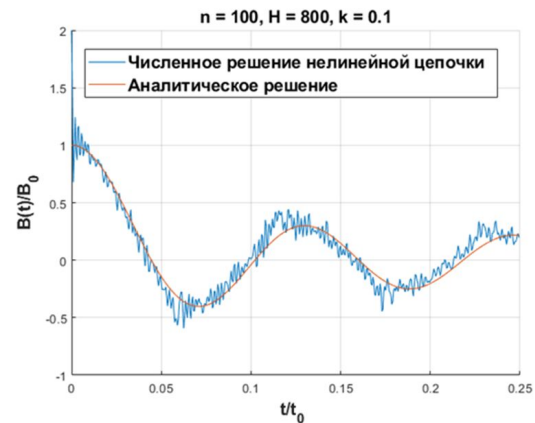
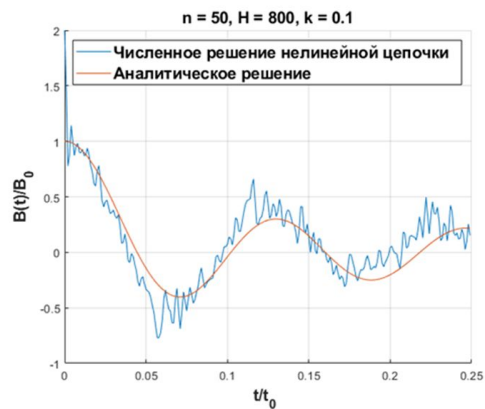
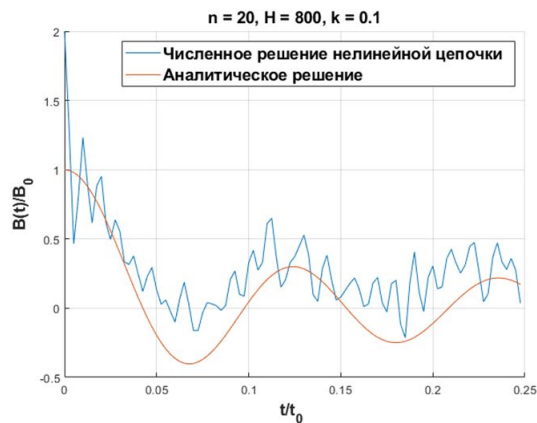
$$k = \frac{A}{D} = 0.1$$

Влияние числа реализаций на среднюю квадратичную ошибку

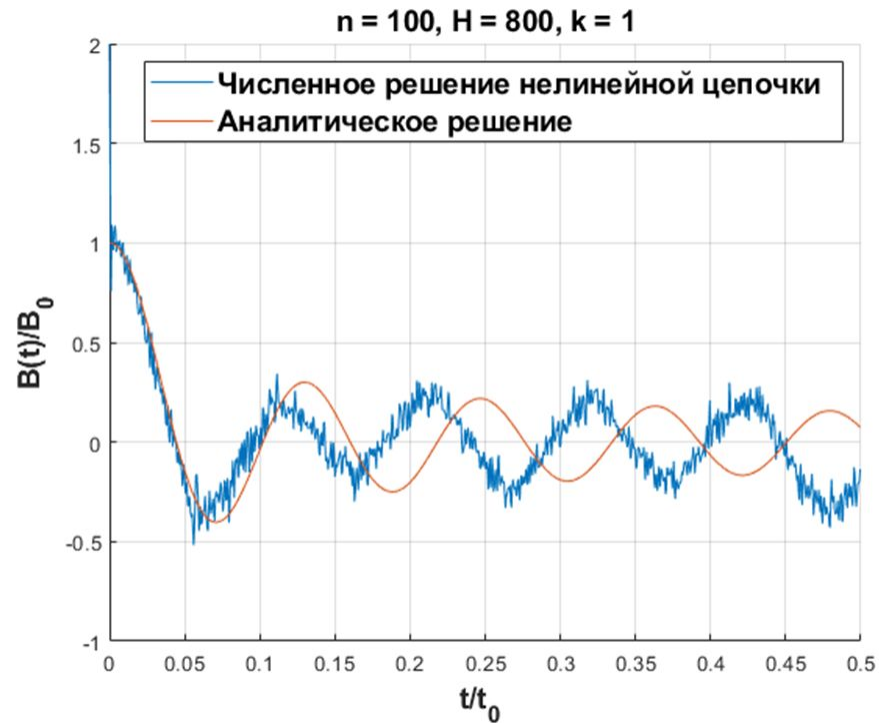
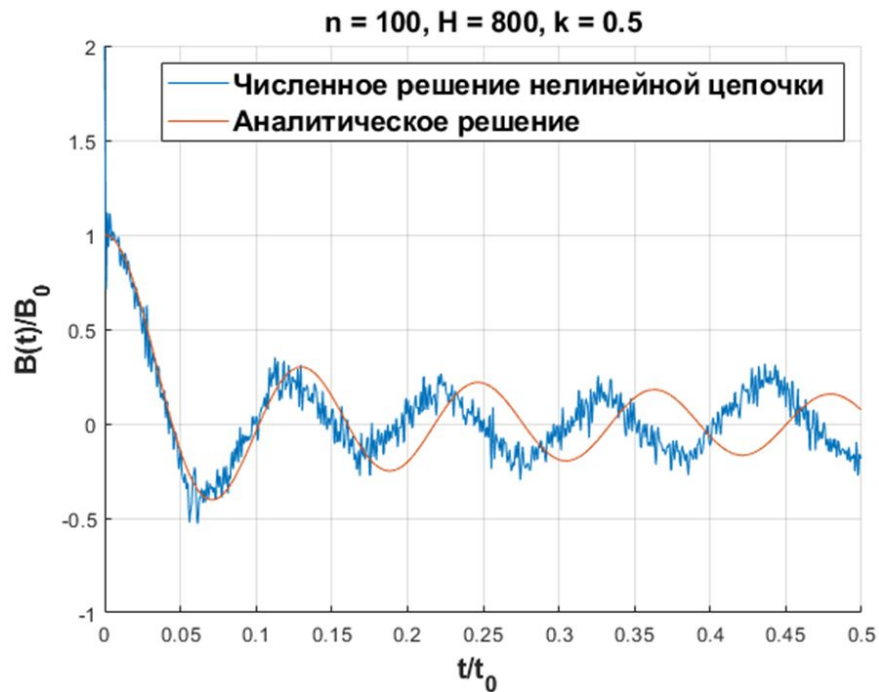


$$\sigma = \frac{1}{T} \sum_{i=1}^T |T_i^{kin} - J_0(kcdti)|^2$$

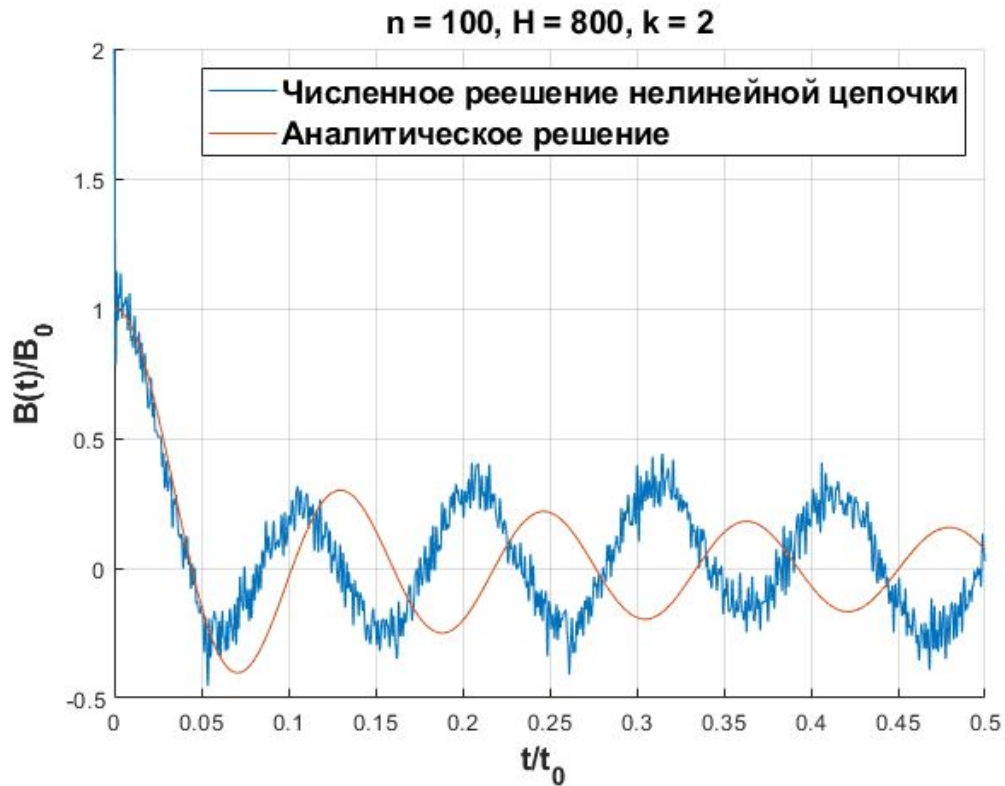
Влияние числа частиц на поведение $B(t)$



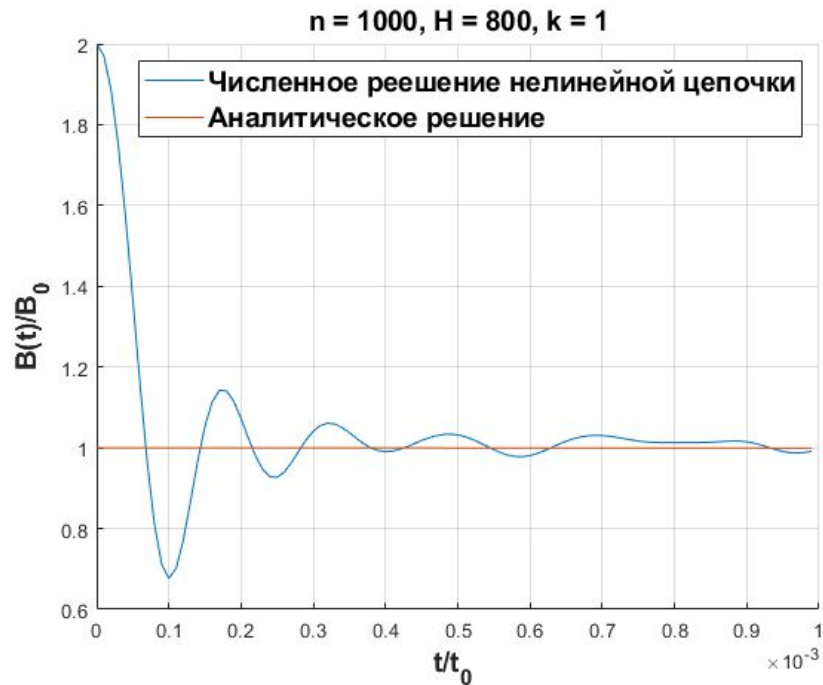
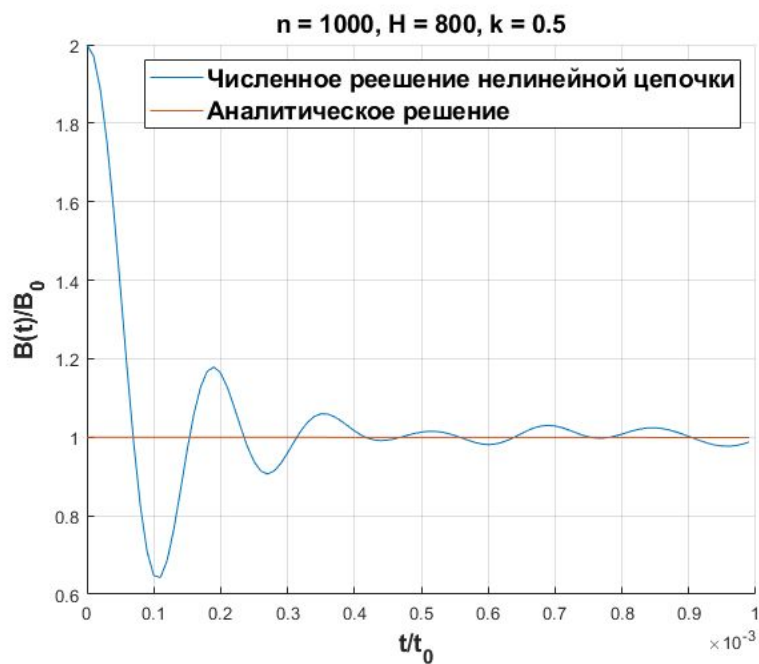
Высокая нелинейность



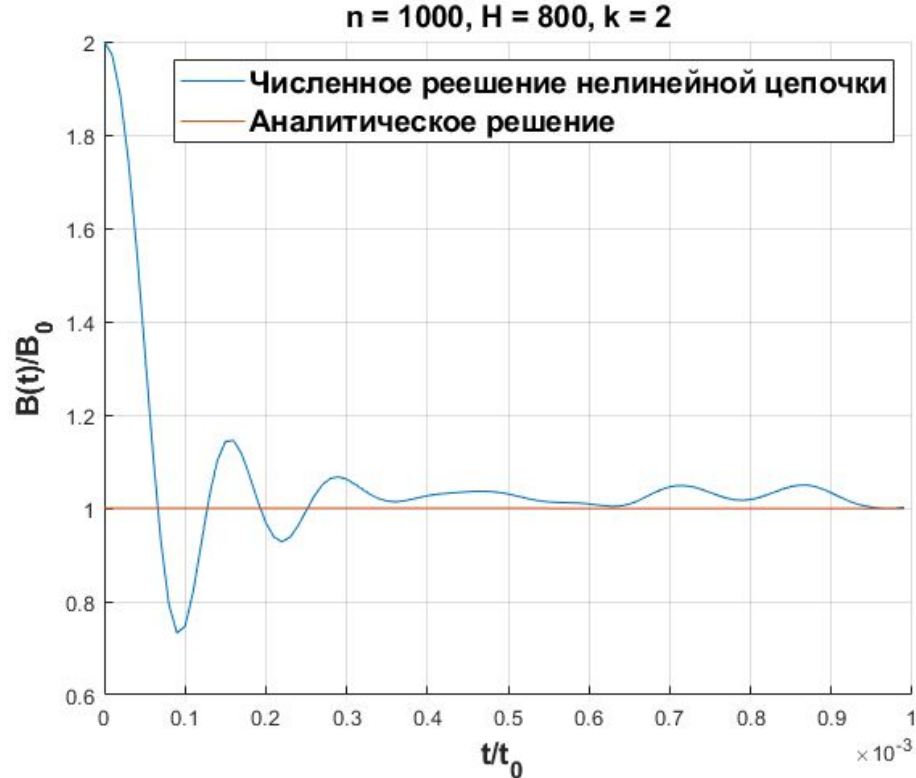
Высокая нелинейность



Высокая нелинейность на малых временах



Высокая нелинейность на малых временах



Результаты

1. Построены две модели: линейная и нелинейная
2. Проведен сравнительный анализ полученных результатов для моделей с актуальной статьей
3. Исследована зависимость поведения кинетической температуры от числа реализаций и числа частиц
4. Исследованы изменения кинетической температуры при повышении нелинейности на малых и больших временах

Спасибо за внимание!