

Секция «Математика и механика»

Моделирование молекулярной динамики с помощью уравнения sin-Гордон

*Рыбьяков Антон Сергеевич*

*Студент*

*Тюменский государственные университет, Институт математики и*

*компьютерных наук, Тюмень, Россия*

*E-mail: rybjakowant@gmail.com*

Известно, что в непрерывных системах описываемых уравнением sin-Гордон существуют нелинейные локализованные колебания. В дискретных системах эти фундаментальные решения теряют энергию в виде излучения фононов [1]. С другой стороны, полная энергия в таких системах остается постоянной, значит, можно было бы ожидать, что при определенных условиях часть энергии нормальных колебаний переходит в нелинейные моды.

В данной работе рассматривается одномерная решетка из  $N + 2$  материальных точек массы  $m$ . Каждая частица соединена с ближайшими соседями линейными упругими силами. Система находится во внешнем периодическом потенциальном поле. Крайние частицы неподвижны. Полная энергия такой системы определяется гамильтонианом [1]:

$$H = \frac{m}{2} \sum_{j=1}^N \left( \frac{dx_j}{dt} \right)^2 + \frac{k}{2} \sum_{j=1}^{N+1} (x_j - x_{j-1} - d)^2 + \gamma \sum_{j=1}^N \left( 1 - \cos \frac{2\pi x_j}{a} \right) \quad (1)$$

где  $x_j$  - координата  $j$ -й частицы,  $m$  - масса,  $d$  - расстояние между двумя соседними частицами,  $a$  - период внешнего потенциала,  $\gamma$  - амплитуда внешнего потенциала,  $k$  - коэффициент жесткости.

Если сделать замену  $x_j = jd + u_j$ , то гамильтониан системы примет вид:

$$H = \frac{m}{2} \sum_{j=1}^N \left( \frac{du_j}{dt} \right)^2 + \frac{k}{2} \sum_{j=1}^{N+1} (u_j - u_{j-1})^2 + \gamma \sum_{j=1}^N \left( 1 - \cos \frac{2\pi u_j}{a} \right) \quad (2)$$

где теперь  $u_j$  - смещение  $j$ -й частицы относительно своего положения равновесия.

Предполагается, что  $d = a = 2\pi$ . Уравнения движения частиц тогда приобретают следующий вид:

$$\frac{du_j}{dt} = v_j \quad (3)$$

$$\frac{dv_j}{dt} = k(u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}) + \gamma \sin u_j \quad (4)$$

$$j = 1 \dots N \quad (5)$$

где  $v_j$  - скорость  $j$ -й частицы при условии  $u_0 = 0$ ,  $u_{N+1} = 0$ .

Система решается численно методом Рунге-Кутты четвертого порядка. В начальный момент задаются смещения частиц, соответствующие первой нормальной моде колебаний. Скорости в начальный момент равны нулю. При определенном выборе параметров

в системе затухают коллективные колебания и возникают локализованные колебания частиц.

Также, система решалась с другим начальным условием: в начальный момент отклонялась от своего положения равновесия одна частица. Если коэффициент  $\gamma$  по порядку был больше  $k$ , то энергия отклонённой частицы распределялась равномерно по всем остальным осцилляторам. Если же  $\gamma > k$ , то большая часть энергии оставалась в первоначально отклонённой частице и двух её соседях.

### **Литература**

1. Браун О.М., Кившарь Ю.С. Модель Френкеля-Конторовой. Концепции, методы, приложения. М.: ФИЗМАТЛИТ. 2008.