

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ Н.Г.ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

Кафедра радиофизики и нелинейной динамики

**Исследование солитонов и кротионов в двумерной решетке
потенциально связанных частиц.**

АВТОРЕФЕРАТ БАКАЛАВРСКОЙ РАБОТЫ

Студента 4 курса 4032 группы
направления 03.03.03 Радиофизика
Института физики
Елатенцева Романа Дмитриевича

Научный руководитель
профессор, д.ф.-м.н., профессор _____ А.П. Четвериков

Зав. кафедрой радиофизики
и нелинейной динамики,
д.ф.-м.н., доцент _____ Г.И. Стрелкова

Саратов 2021 г.

Содержание

Введение.....	3
1. Теоретическая часть.....	5
2. Практическая часть.....	6
Заключение.....	11
Список использованных источников.....	12

Введение

В настоящее время нелинейная динамика является одним из быстро развивающихся разделов науки. Одним из направлений исследований является нелинейная динамика решеток, в частности, решеток взаимодействующих частиц. Решетки, состоящие из точечно связанных масс, способны поддерживать возбуждения различных высокоэнергетических локализованных волн мобильного или немобильного типа. К локализованным нелинейным модам относятся солитоны, кроудионы, бризеры, кинки и др. [1].

По определению, солитон – это уединенная стационарная волна, способная распространяться в нелинейной среде на большие расстояния, практически не рассеивая свою энергию [2]. Для того, чтобы не происходило образование дефектов решетки можно возбудить квазиодномерный солитон с низкой энергией, в том числе, в случае использования двуслойных решеток [3]. Однако, обычно длина распространения квазиодномерного солитона ограничивается несколькими десятками межатомных расстояния. Для увеличения длины возможно возбуждение солитонов в нескольких (M) рядах решетки [4]. Возможность моделирования и изучения свойств M -солитонов в двумерной треугольной решетке с потенциалом межчастичного взаимодействия Морзе определяет **актуальность** данной работы.

Целями выпускной работы являются:

- изучение распространения локализованных колебаний в одномерной и двумерной треугольной решетках потенциально связанных частиц с потенциалом взаимодействия Морзе.

- выполнение численных экспериментов для реализации заданий для выпускной работы.

Для достижения поставленных целей необходимо было решить следующие **задачи**:

- провести анализ известных результатов исследований локализованных колебаний в одномерных и двумерных решетках потенциально связанных частиц,

- изучить уравнения модели двумерной решетки с потенциалом Морзе.

- провести моделирование решетки точечных связанных частиц с помощью методов молекулярно-динамического моделирования,

- исследовать динамику солитонов и кроудионов в треугольной решетке Морзе посредством численного эксперимента.

- провести анализ данных, полученных в результате эксперимента.

Объект исследования - двумерная треугольная решетка потенциально связанных частиц.

Предмет исследования - нелинейные возбуждения кристаллической решетки.

Метод исследования:

В данном проекте, методами молекулярно-динамического моделирования будет изучена динамика наноразмерных нелинейных возбуждений кристаллической решетки.

1. Теоретическая часть

Теоретическая часть дипломной работы состоит из трех глав. Первой главой является обзор литературы по локализованным колебаниям в одномерных и двумерных решетках потенциально связанных частиц. Во второй главе рассмотрена модель двумерной решетки с потенциалом Морзе и ее основные уравнения.

При изучении динамики нелинейных пространственно-локализованных колебательных мод в кристаллических решетках используется метод компьютерного моделирования. Двумерную решетку можно представить, как совокупность одномерных цепочек, которые располагаются параллельно друг другу на равновесном расстоянии. Для моделирования решетки расположения частиц и размеров ячейки используются решетки с квадратичной, треугольной или другой симметрий. В данной работе рассматривается наиболее устойчивая из них треугольная решетка точечных частиц с количеством частиц по осям x, y 80×20 атомов. Все исследования проводим в декартовой системе координат, по осям которой наложены периодические граничные условия. Взаимодействие атомов кристаллической решетки происходит под действием потенциальных связей Морзе. Основным принципом численного моделирования данной модели является решение дифференциальных уравнений методом Рунге-Кутты четвертого порядка.

2. Практическая часть

Практическая часть работы изложена в одной главе, посвященной динамике солитонов и кроудионов в треугольной решетке Морзе.

Сначала было рассмотрено распространение высокоэнергетических сверхзвуковых солитонов в $M=1$ рядах решетки при параметре (амплитуде солитона) $A=1.5$, числу частиц $N=1600$ и $b\sigma = 4$.

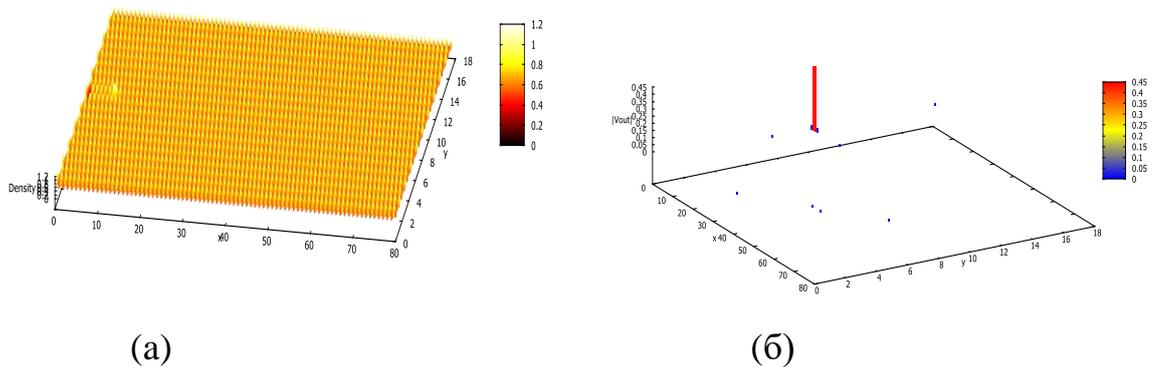
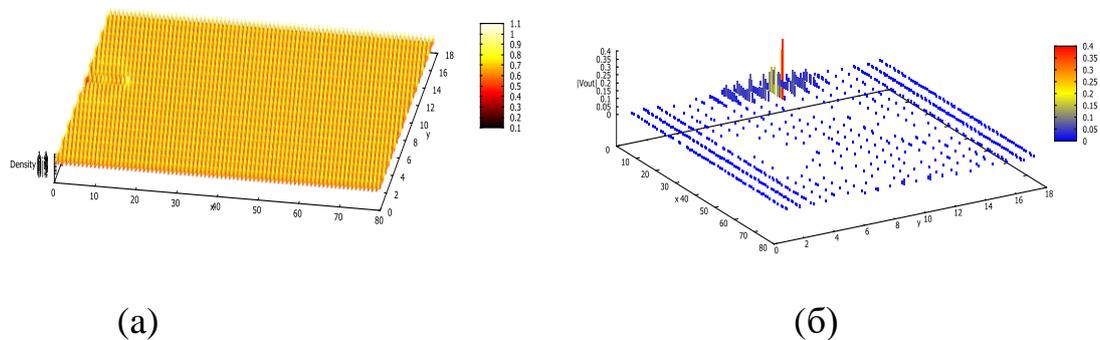


Рис.1. Треугольная решетка Морзе. а) Распределения плотности $\rho(x, y)$, б) модуля скорости $|V_n|$ в начальный момент времени $t = 0$ при $N = 1600$, $b\sigma = 4$,

На рис.1 показано, как первоначально возбужденный солитон движется с малой потерей энергии. Это объясняется тем, что спектр возмущений бегущего солитона выше критической частоты фононной полосы.



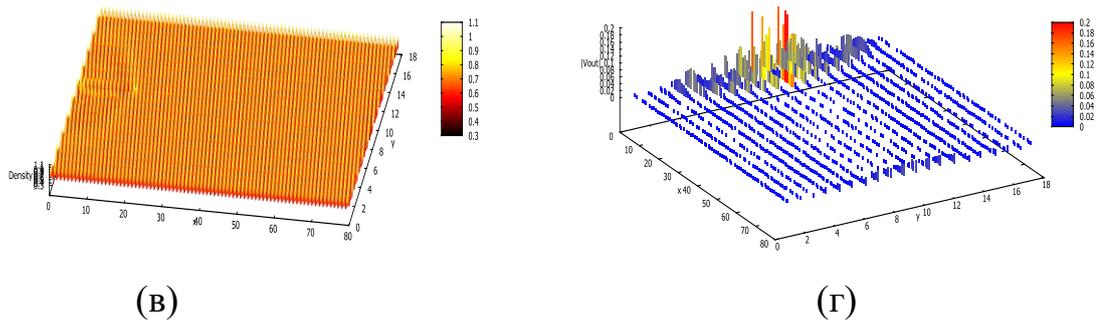


Рис.2. Треугольная решетка Морзе. Распределения плотности $\rho(x, y)$ (а,в) и модуля скорости $|V_n|$ (б,г) в промежуточный момент времени $t = 2$ (а,б) и в момент времени за мгновение до распада квазиодномерного солитона $t=5$ (в,г) при $N = 1600$, $b\sigma = 4$ и $A = 1.5$.

С увеличением времени движения (рис.2.) скорость солитона V_{sol} уменьшается. Длина пути квазиодномерного возбуждения увеличивается с амплитудой начального возбуждения A . Однако при высоких значениях A происходит возбуждение кроудиона, что приводит к нежелательной деформации решетки (рис.3).

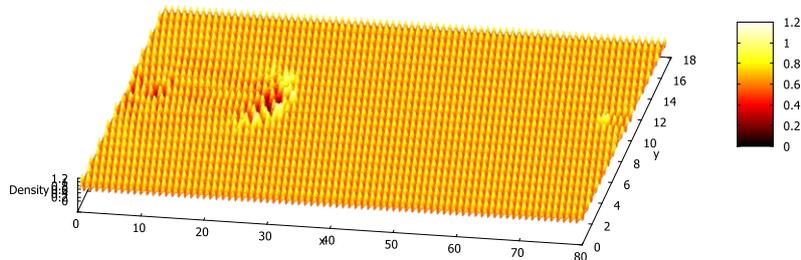


Рис.3. Треугольная решетка Морзе. Распределения плотности $\rho(x, y)$ момент времени $t = 5$, $N = 1600$, $b\sigma = 4$ и $A = 3$.

Далее была рассмотрена длина пути квазиодномерного возбуждения с увеличением числа солитонов в соседних атомных рядах M , при параметре $A=1.5$, числу частиц $N=1600$ и $b\sigma = 4$.

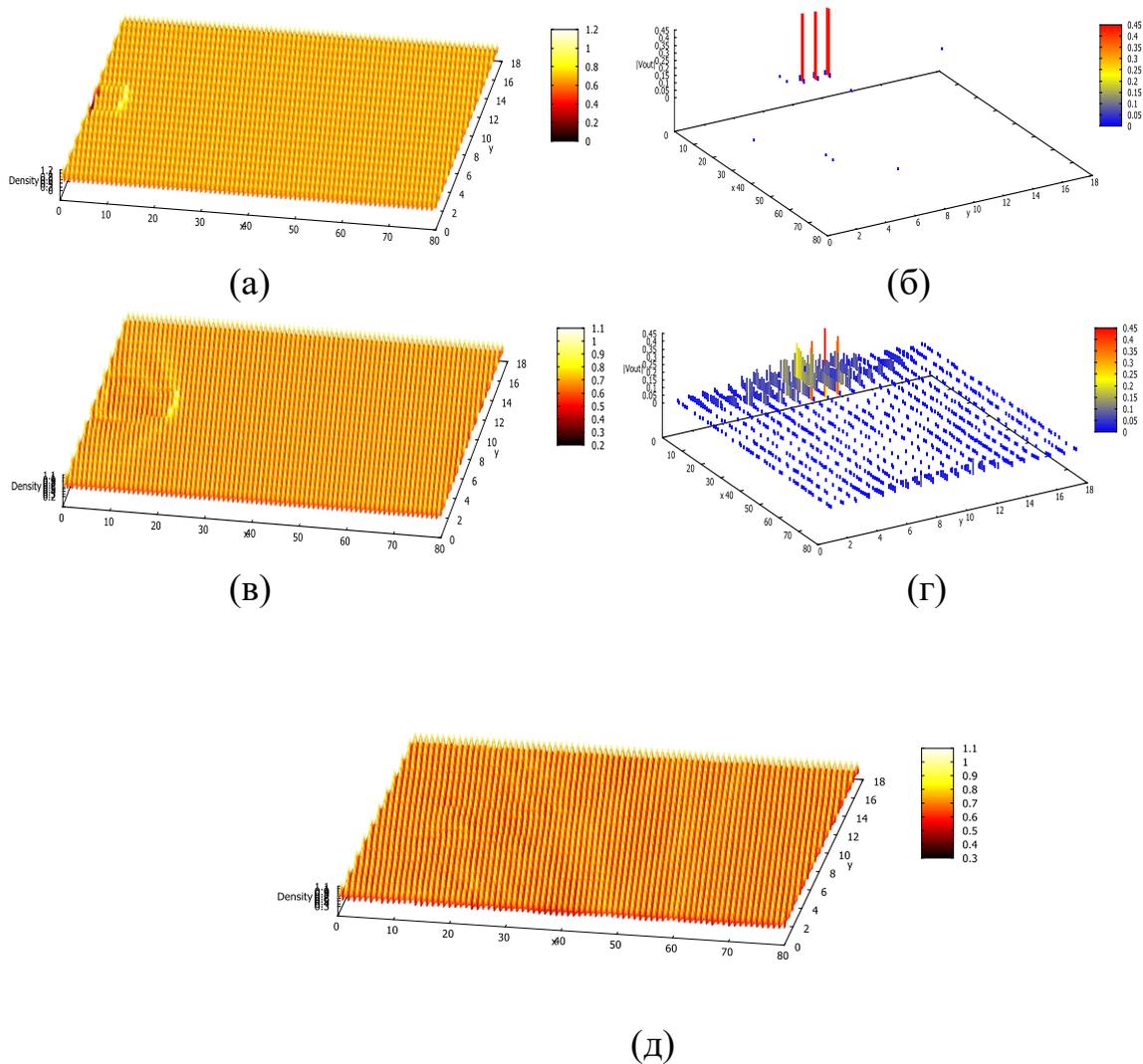


Рис.4. Треугольная решетка Морзе. Распределения плотности $\rho(x, y)$ (а,в) и модуля скорости $|\mathbf{V}_n|$ (б,г) в начальный момент времени $t = 0$ (а,в), в промежуточный момент времени $t=5$ (в,г) и при большом времени $t=40$ (д) с возбуждением солитонов в $M=3$ соседних рядах при $N = 1600$, $b\sigma = 4$ и $A = 1.5$.

На основании полученных данных можно сделать вывод, что при увеличении числа возбужденных солитонов в рядах M , увеличивается длина пути (рис.5).

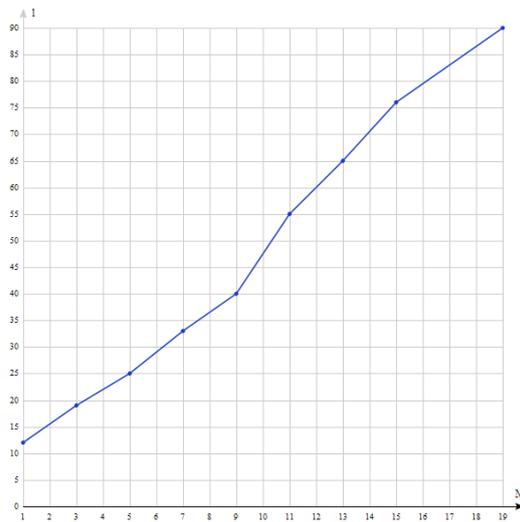


Рис.5.Треугольная решетка Морзе. Зависимость длины локализованного солитонного возбуждения от числа M возбужденных солитонов в соседних строках. $N = 1600$, $b\sigma = 4$, $A = 1.5$.

При возбуждении $M=20$ рядов кольцевые солитоны полностью проходят решетку и продолжают движение из начальных координат (рис. 6).

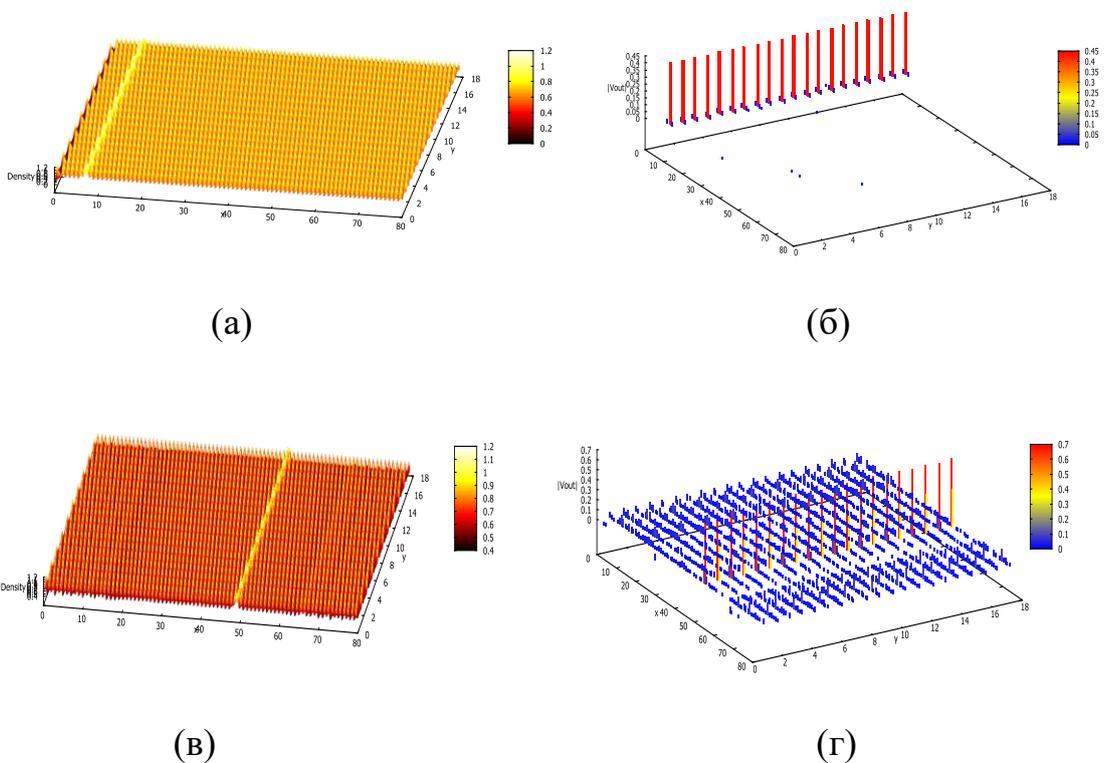


Рис.6. Треугольная решетка Морзе. Распределения плотности $\rho(x, y)$ (а,в) и модуля скорости $|V_n|$ (б,г) в начальный момент времени $t = 20$ (а,в), в

промежуточный момент времени $t=35$ (в,г) с возбуждением (кольцевых) солитонов в $M=20$ соседних рядах при $N = 1600$, $b\sigma = 4$ и $A = 1.5$.

Кольцевая солитонная волна затухает и распадается только при значительно большем времени, чем любая из некольцевых волн (рис.7)

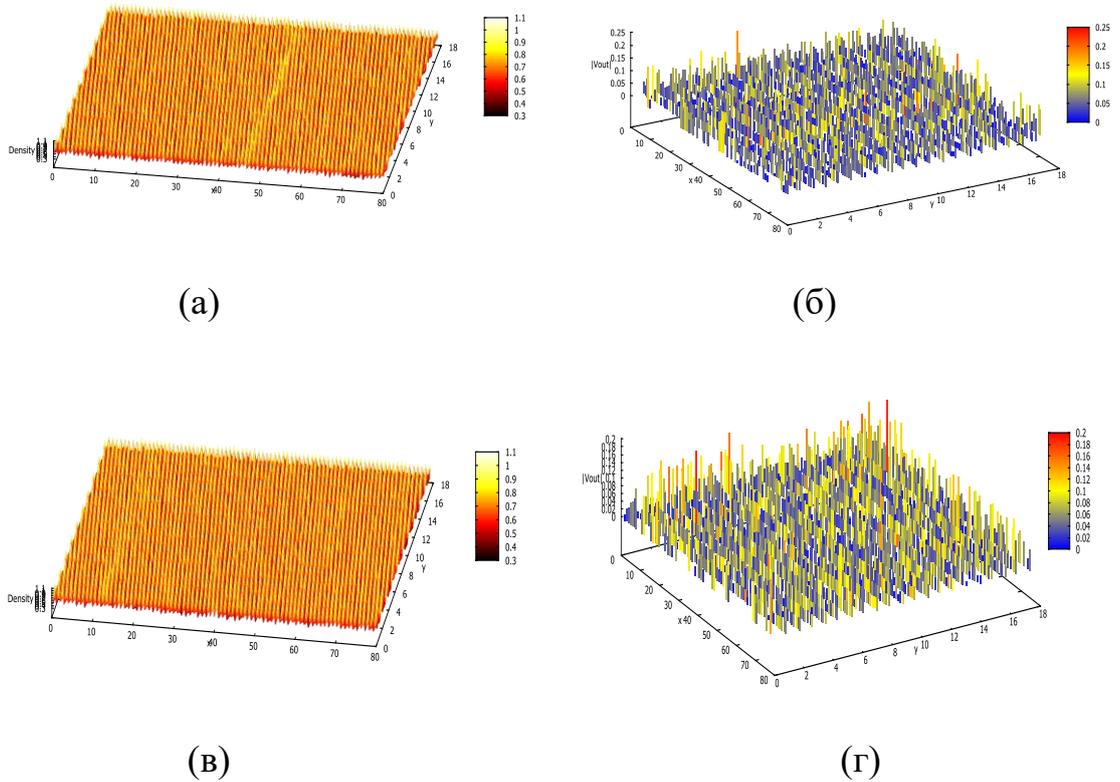


Рис.7. Треугольная решетка Морзе. Распределения плотности $\rho(x, y)$ (а,в) и модуля скорости $|V_n|$ (б,г) в момент времени $t = 400$ (а,в) и в момент времени $t=500$ (в,г) с возбуждением солитонов в $M=20$ соседних рядах при $N = 1600$, $b\sigma = 4$ и $A = 1.5$.

Заключение

В рамках данной работы были рассмотрены результаты исследований локализованных колебаний в решетках потенциально связанных частиц и выполнено компьютерное моделирование динамики треугольной решетки точечных частиц, взаимодействующих через потенциальные силы Морзе. В ходе моделирования были изучены квазиодномерные сверхзвуковые солитоны и краудионы, а также возбуждения «широких» солитонов M соседних атомных рядах при различных амплитудах A . В результате было показано, что с ростом амплитуды происходит не только возбуждение кроудионов и увеличение длины траектории движения, но и увеличивается количество дефектов решетки. Некоторые из таких дефектов были визуализированы графически.

Исходя из результатов эксперимента, можно сделать вывод, что расстояние, пройденное солитоном, не слишком велико из-за потерь энергии при взаимодействии с первоначально невозмущенными рядами. Также было показано, что при увеличении числа возбужденных квазиодномерных солитонов в M рядах происходит рост длины траектории. При возбуждении максимального числа M рядов можно было наблюдать возникновение кольцевой солитонной волны. Такая волна проходила решетку большое количество раз, т.е. ее время жизни существенно превышало время жизни некольцевых волн.

Изучение солитонов и кроудионов в решетках потенциально связанных частиц играет большую роль в нелинейной динамике. Благодаря развитию компьютерных технологий в наше время можно достаточно точно отслеживать динамику локализованных возбуждений в различных системах, что позволяет описывать все происходящие в них процессы.

Список использованных источников

1. Sievers, A. J. Intrinsic Localized Modes in Anharmonic Crystals / A. J. Sievers, S. Takeno // *Physical Review Letters*. – 1988. – Vol. 61. – № 8. – P. 970-973.
2. N.J.Zabusky and M.D.Kruskal (1965), Interaction of solitons in a collisionless plasma and the recurrence of initial states, *Phys.Rev.Lett.*, 15 pp. 240—243.
3. A.P. Chetverikov, W. Ebeling, M.G. Velarde // *Physica D* 240 (2011) 1954.
4. A.P. Chetverikov, S.V. Dmitriev, W. Ebeling, E.A. Korznikova, M.G. Velarde
Localized lump-soliton-like excitations in triangular morse lattices-2018/
Materials Physics and Mechanics 35(1):16-20
5. С. В. Дмитриев, Е. А. Корзникова, А. П. Четвериков: СВЕРХЗВУКОВЫЕ N-КРАУДИОНЫ В ДВУМЕРНОМ КРИСТАЛЛЕ МОРЗЕ. *ЖЭТФ*, 2018, том 153, вып. 3, стр. 417–423
6. Е. А. Корзникова, И. А. Шепелев, А. П. Четвериков и др. *ЖЭТФ*, том 154, вып. 6 (12), 2018