

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

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

Кафедра радиофизики и нелинейной динамики

**Кольцевые волны и волны с ограниченным фронтом в двумерной Морзе
решетке**

АВТОРЕФЕРАТ МАГИСТЕРСКОЙ РАБОТЫ

студента 2 курса 2232 группы
направления 03.04.03 Радиофизика
Института физики
Елатенцева Романа Дмитриевича

Научный руководитель

доцент, к.ф.-м.н.

_____ К.С. Сергеев

Зав. кафедрой радиофизики

и нелинейной динамики,

д.ф.-м.н., доцент

_____ Г.И. Стрелкова

Саратов 2023 г.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Одним из направлений исследований в области нелинейной динамики является моделирование поведения решеток и цепочек взаимодействующих элементов (атомов, частиц или осцилляторов). Ввиду нелинейности связей происходит обмен энергией между колебательными модами, появление дефектов кристаллической решетки, изменяющих ее свойства, и т.д. Основные колебательные моды носят название локализованных нелинейных мод [1], к которым относятся солитоны, кроудионы, бризеры, кинки и др. По определению, солитон – уединенная волна способная распространяться на большие расстояния без изменения формы и без потери энергии [2]. Однако в реальности приходится иметь дело с солитоноподобными волнами, которые обладают свойствами солитонов, но амплитуда которых со временем затухает, что приводит к ограничению их времени жизни. В связи с этим предметом исследования данной работы являются волны солитонного типа.

Обычно при исследовании динамики цепочек используют модели, в которых консервативные элементы связаны нелинейными потенциальными силами. Например, в исследовании локализованных мод [3] численно моделировалось распространение солитоноподобных возбуждений с участием M соседних (смежных) атомных рядов в треугольных решетках консервативных частиц. При увеличении числа возбужденных солитонов в M смежных рядах наблюдается пропорциональный рост времени жизни и длины траектории. Также существуют решетки, состоящие из активных частиц главным отличием которых является возможность подкачки энергии из внешней среды [4,5]. Например, в исследовании [6] рассматривалась решетка с треугольной симметрией элементарной ячейки, состоящей из активных частиц. Основным отличием моделей, изучаемых в [3] и [6], является только наличие нелинейного отрицательного трения, которое в [6] имеет форму трения Рэлея.

Изучение локализованных мод в консервативных решетках не ограничивается классическим распространением M -солитонов. Также

возможно возбуждение солитонов «через ряд» и встречных солитонных волн разного типа и изучение их свойств после столкновения. Значительный интерес представляет изучение моделей активных решеток, по характеру «активности» находящихся между двух указанных выше предельных случаев.

Актуальность выбранной темы подтверждается большим количеством публикаций по смежным тематикам. При этом солитоноподобные волны в решетках активных частиц освещены в меньшей степени, хотя их динамика зачастую более богата и разнообразна.

Цель выпускной квалификационной работы заключается в установлении закономерностей распространения локализованных волн в двумерной треугольной консервативной и «консервативно-активной» (с отрицательным нелинейным трением) решетке потенциально связанных частиц с потенциалом взаимодействия Морзе.

Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие **задачи:**

- провести анализ известных результатов исследований локализованных колебаний и волн в различных решетках потенциально связанных частиц,
- изучить уравнения модели двумерной консервативной решетки и решетки с отрицательным нелинейным трением с потенциалами Морзе,
- провести моделирование решеток точно связанных частиц с помощью методов молекулярно-динамического моделирования,
- исследовать динамику солитоноподобных волн в треугольной решетке Морзе посредством численного эксперимента,
- провести анализ данных, полученных в результате эксперимента.

Объект исследования - двумерная решетка потенциально связанных частиц. **Предмет исследования** - нелинейные возбуждения в дискретной распределенной структуре. **Научная новизна** результатов исследования определяется динамикой возбуждения нелинейных солитонных волн в решетке консервативных частиц с периодической подкачкой активных путем включения/выключения отрицательного нелинейного трения Рэлея.

Научная и практическая значимость работы заключается в расширении понимания распространений нелинейных возбуждений в решетках, частицы которых находятся между консервативной и активной связью. Результаты, полученные в ходе данной научной работы, могут найти применение в задачах по транспортировке частиц в молекулярных решетках.

Метод исследования:

В данном проекте, динамика наноразмерных нелинейных возбуждений в дискретной регулярной структуре – «кристаллической» решетке – изучается методами молекулярно-динамического моделирования (МД).

Основные результаты работы представлены на конференциях:

1. Студенческая научная конференция института физики, 24 апреля – 5 мая 2023, Р.Д. Елатенцев, К.С. Сергеев, «Влияние накачки на солитоноподобные волны в решетке частиц, связанных нелинейными силами».
2. «Нелинейные дни в Саратове для молодых», 15-19 мая 2023. Р.Д. Елатенцев, К.С. Сергеев, «Влияние накачки на солитоноподобные волны в решетке частиц, связанных нелинейными силами».

Структура работы:

Магистерская работа состоит из введения, трех глав, заключения и списка литературы.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ:

Во введении обоснована актуальность работы, сформулированы ее цели и задачи для их выполнения. Также приведены объект исследования, предмет исследования и основной метод исследования.

Первая глава посвящена анализу литературы по локализованным колебаниям и волнам в различных решетках потенциально связанных частиц.

Во второй главе представлена модель двумерной консервативной решетки с потенциалом Морзе, основные уравнения модели и способы их компьютерного моделирования методом молекулярной динамики. Проведен

анализ полученных результатов исследований распространений солитоноподобных возбуждений в консервативной треугольной решетке.

В данной главе рассматривается наиболее устойчивая (с наименьшей потенциальной энергией) треугольная решетка точечных частиц. Безразмерное смещение n -й частицы от положения равновесия вдоль одной из осей в начальный момент времени задается по рекуррентной формуле, описывающей солитонное решение для одномерной цепочки Морзе:

$$q_n = q_{n+1} + A \frac{1}{3} \ln n \left(1 + \frac{\text{sh}^2 k}{\text{ch}^2(k(n-n_{center})-\text{sh} k \cdot t)} \right), v_n = \dot{q}_n$$

Здесь v_n – соответствующая скорость, A – амплитуда солитонного решения, которая может варьироваться, поскольку для двумерной решетки это решение является лишь приближенным.

Было проведено численное моделирование энергетических сверхзвуковых солитонов в M рядах решетки (рис.1).

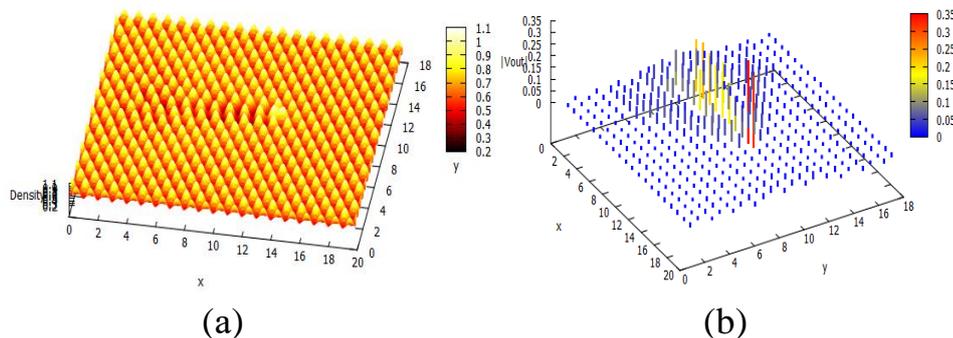


Рис.1. Треугольная решетка Морзе. Распределения плотности $\rho(x, y)$ (a) и модуля скорости $|V_n|$ (b) в промежуточный момент $t=5$.

Исходя из результатов моделирования, длина пути солитонной волны до ее разрушения растет почти пропорционально M (рис.2.11).

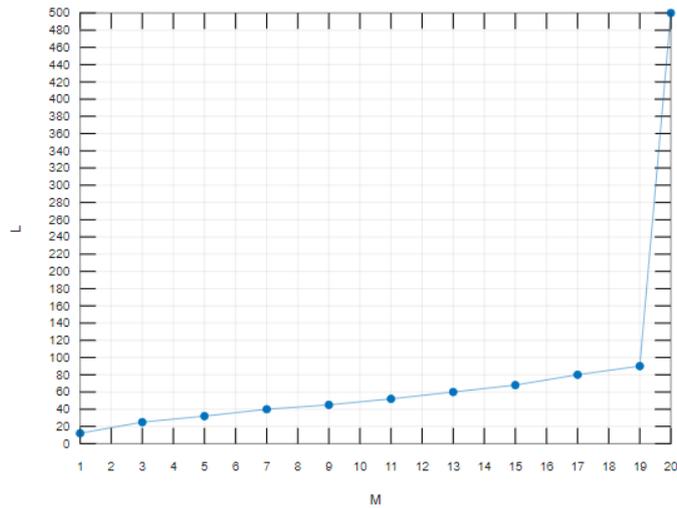


Рис.2. Зависимость длины траектории локализованного солитонного возбуждения от числа M возбужденных солитонов в соседних рядах.

При возбуждении $M=10$ солитонов через ряд происходит образование сплошного плоского фронта волны как в случае с возбуждением всех $M=20$ рядах солитона с «бесконечным фронтом» (рис.3). Так же можно наблюдать побочный эффект такого возбуждения-множество волн, бегущих назад.

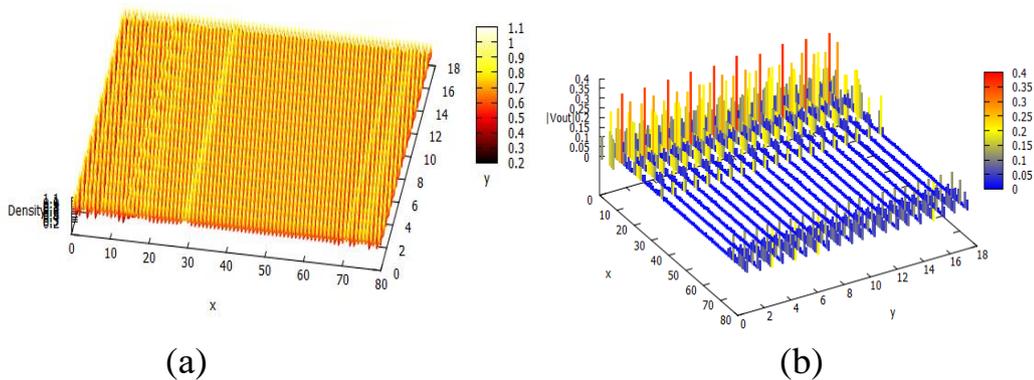


Рис.3. Треугольная решетка Морзе. Распределения плотности $\rho(x, y)$ (a) и модуля скорости $|V_n|$ (b) в промежуточный момент $t=15$.

Распространение встречных солитонов при высоком начальном импульсе происходит с возникновением краудионов после столкновения солитонов (рис.4).

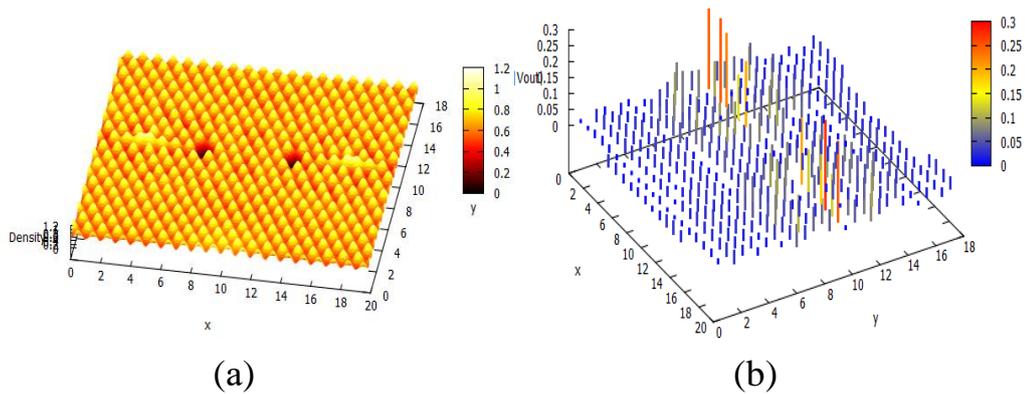


Рис.4. Треугольная решетка Морзе. Распределения плотности $\rho(x, y)$ (a) и модуля скорости $|V_n|$ (b) в момент после столкновения $t=10$.

При возбуждении всех $M=20$ рядов решетки было рассмотрено распространение встречных кольцевых волн т.е солитонных волн с «бесконечным фронтом» (рис.5). Было получено, что встречные кольцевые волны много раз проходят по ячейке и затухают в связи с ослаблением за счет обычных потерь при распространении и соударении солитонов.

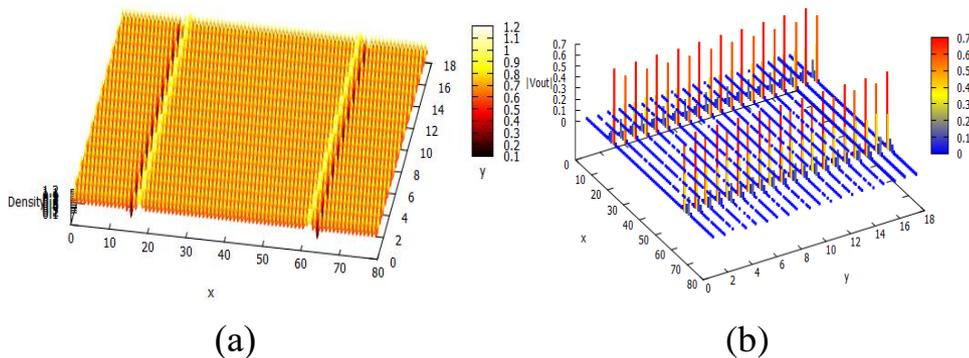


Рис.5. Треугольная решетка Морзе. Распределения плотности $\rho(x, y)$ (a) и модуля скорости $|V_n|$ (b) в начальный момент времени $t = 0$.

В третьей главе рассмотрена модель двумерной решетки с потенциалом морзе при переходе от консервативных частиц к активным, путем периодического включения отрицательного нелинейного трения. Приведены основные уравнения модели и способы их компьютерного моделирования методом молекулярной динамики. Проведен анализ полученных результатов исследований распространений M-солитоноподобных возбуждений в данной

треугольной решетке. Безразмерное смещение i -й частицы от положения равновесия вдоль одной из осей:

$$\begin{aligned} \ddot{\vec{q}}_i - \mu \left(1 - \frac{|\vec{q}_i|^2}{v_0^2} \right) \dot{\vec{q}}_i = \\ = \sum_{|\vec{q}_i^k| < R} \frac{\vec{q}_i^k}{|\vec{q}_i^k|} \left((e^{b\sigma - |\vec{q}_i^k|} - e^{2(b\sigma - |\vec{q}_i^k|)}) \frac{1}{1 + e^{\frac{|\vec{q}_i^k|}{b-d} - 2v}} - \frac{1}{2b} \frac{e^{2(b\sigma - |\vec{q}_i^k|)} - 2e^{b\sigma - |\vec{q}_i^k|}}{2v \left(e^{\frac{|\vec{q}_i^k|}{b-d} - 2v} + 1 \right)} e^{\frac{|\vec{q}_i^k|}{b-d}} \right) \end{aligned}$$

Здесь мы используем безразмерную координату $\vec{q}_i = b\vec{r}_i$ (где $\vec{r}_i = \{x_i; y_i\}$ определяют фактические координаты частиц), $\dot{\vec{q}}_i = \frac{\omega_c}{b} \vec{v}_i$ - безразмерная скорость, где избыточная точка означает дифференцирование по отношению к безразмерному времени $\tau = \omega_c t$. Параметр $\mu = \tilde{\mu} \omega_c / b$ представляет собой безразмерный линейный отрицательный коэффициент трения, $v_0 = \tilde{v}_0 \frac{b}{\omega_M}$ является стационарным значением скорости, $|\vec{q}_i^k|$ является безразмерным расстоянием между частицами i и k и $\frac{\vec{q}_i^k}{|\vec{q}_i^k|}$ - единичный вектор, направленный от i -й частицы к k -й.

Рассмотрена динамика распространения M -солитона в решетке с выбранным значением жесткости потенциала $b=4$ и параметрами периодического включения отрицательного нелинейного трения $\mu=0$, $\mu=2$. При включении нелинейного трения происходит подкачка частиц энергией и сглаживание фронта солитонной волны. Это явление наблюдается и при увеличении числа первоначально возбужденных M -солитонов.

Было получено, что в случае решетки, состоящей из консервативных частиц при большом времени распространения $M=23$ солитонов происходит сильное возбуждение частиц, сопровождающееся потерей симметрии и структуры решетки. Однако при включении отрицательного нелинейного трения солитонная волна продолжает распространяться.

Так, в обоих случаях ($\mu = 0$ и $\mu = 2$) при увеличении числа М-солитонов растет длина их распространения (рис. 6).

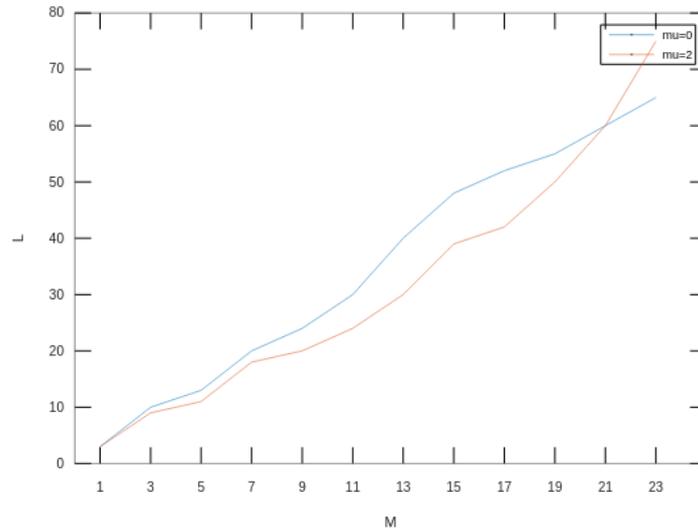


Рис.6. Зависимость длины пробега М-солитонов при $\mu=0$, $\mu=2$.

При повышении параметра μ до экстремальных значений происходит быстрое затухание солитонной волны (рис.7).

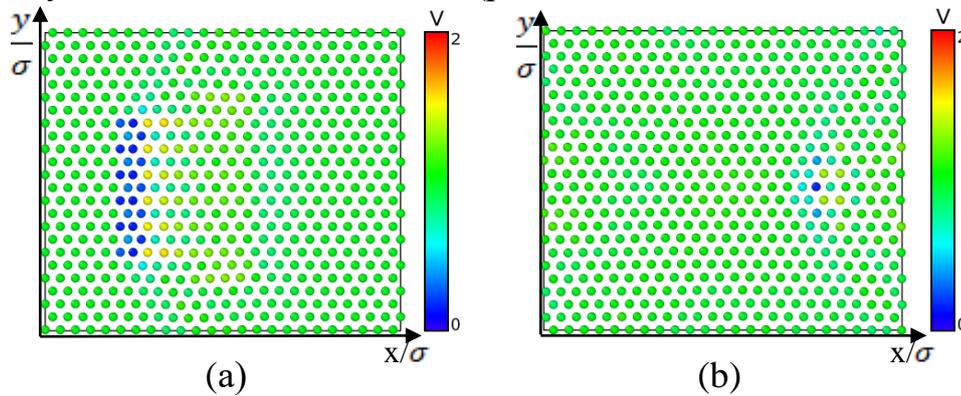


Рис.7. Распространение $M=15$ солитона: при $\mu=10$ (a) $\tau=100$, (b) $\tau=320$.

Показано, что при увеличении нелинейного трения μ происходит уменьшение длины распространения солитона.

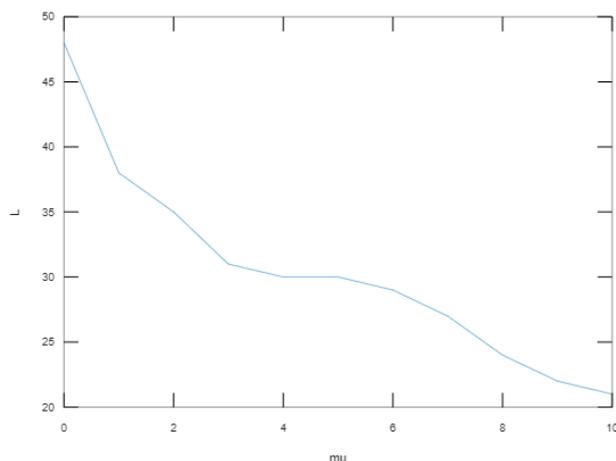


Рис.8. Зависимость длины пробега $M=15$ солитона при $\mu=0-10$.

В решетке консервативных частиц ($\mu=0$) солитонная волна проходит решетку несколько раз возбуждая при этом множество фононов позади волны и в конечном итоге происходит разрушение решетки, а при включенном параметре отрицательного трения ($\mu=2$) продолжает распространяться (рис.9)

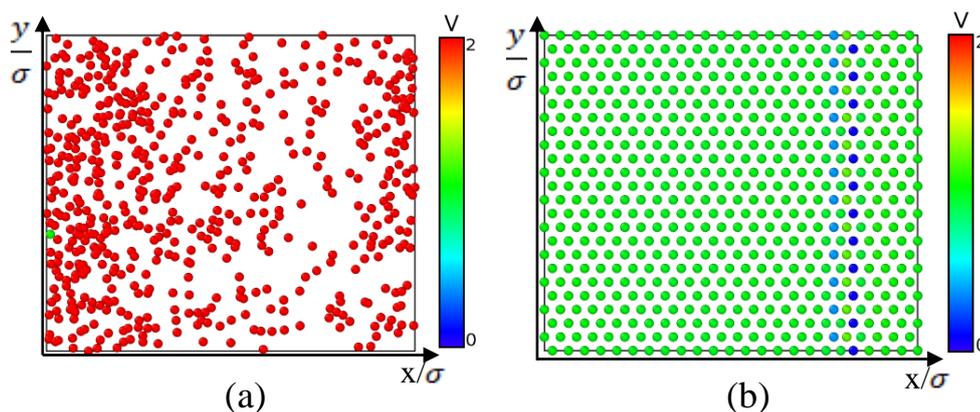


Рис.9. Распространение $M=24$ солитона при $\mu=0$, (a) $\tau=1500$; $\mu=2$, (a) $\tau=1500$.

Получено, что при увеличении периода включения нелинейного трения с течением времени при обоих параметрах μ происходит сильное возмущение решетки позади солитона которое вызывает его торможение при последующих проходах решетки.

Выводы и основные результаты работы:

1. Были проведены исследования локализованных колебаний в различных решетках потенциально связанных частиц и выполнено компьютерное

моделирование динамики треугольной решетки консервативных и активных точечных частиц, взаимодействующих через потенциальные силы Морзе.

2. Было показано, что с увеличением начального возбуждения солитона выше некоторого порогового значения происходит возбуждение краудионов и увеличение длины траектории движения.

3. Рассмотрено распространение M -солитонов в решетке консервативных частиц при возбуждении «через ряд». Распространение $M=10$ солитонов через ряд происходит с образованием сплошного плоского фронта волны как при возбуждении всех $M=20$ рядов. Однако длина распространения солитонной волны в таком случае намного меньше из-за того, что энергия в два раза меньше, чем во втором случае. После столкновения солитонов и прохождении друг через друга солитонные волны не теряют своей формы, что соответствует определению солитона.

4. При возбуждении максимального числа M рядов было рассмотрено распространение встречных кольцевых волн т.е. солитонов с «бесконечным» фронтом. Время жизни таких волн оказалось в 2,5 раза меньше, чем у одной волны в связи с ослаблением за счет обычных потерь при столкновении солитонов.

5. Также была рассмотрена динамика распространения M -солитона в решетке с периодическим включением/выключением отрицательного нелинейного трения μ . Так при увеличении числа M -солитонов в консервативном случае длина их распространения немного больше, чем при использовании параметра μ . Но при приближении количества возбужденных солитонов к максимальному ($M=24$) проходящая солитонная волна с параметром $\mu=0$ оставляет нежелательные возбуждения решетки. Увеличение параметра нелинейного трения приводит к уменьшению длины распространения солитона. Было рассмотрено распространение солитона «бесконечным» фронтом путем возбуждения всех смежных рядов. В консервативном случае при прохождении солитона происходит разрушение решетки. В случае с нелинейным трением разрушения не происходит, что

значительно повышает время жизни солитона. Также было исследовано влияние увеличения параметра трения на солитон с «бесконечным» фронтом. При увеличении параметра до экстремальных значений $\mu=10$, солитон затухает на очень коротком расстоянии. При увеличении периода T включения нелинейного трения увеличивается возбуждение решетки, которое частично компенсируется увеличением параметра отрицательного нелинейного трения.

6. На основании данных компьютерных экспериментов были построены графики зависимости длины траектории локализованного солитонного возбуждения от его числа M возбужденных солитонов в соседних рядах, зависимость длины распространения M -солитона от параметра отрицательного трения и зависимость длины $M=15$ солитона от величины параметра трения μ .

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, 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
4. Schweitzer F. Brownian agents and active particles: collective dynamics in the natural and social sciences // Springer Science and Business Media, 2007.
5. Bechinger C., Leonardo R., Lowen H., Reichhardt C., Volpe G. Active particles in complex and crowded environments // *Rev. Mod. Phys.*, 2016, vol. 88.
6. Sergeev K. S., Dmitriev S. V., Ebeling W., Korznikova E. A., Chetverikov A. P. Stationary Modes and Localized Metastable States in a Triangular Lattice of Active Particles // *Russian Journal of Nonlinear Dynamics*, 2018, vol. 14, no. 2, P. 195–207.