УДК544.223.2:531.53

ПРОБЛЕМА МОДЕЛЮВАННЯ КОЛИВАЛЬНИХ ПРОЦЕСІВ В ОДНОВИМІРНИХ КРИСТАЛАХ З ВИКОРИСТАННЯМ МАТЕМАТИЧНИХ МАЯТНИКІВ

Брежнєв О.В., Єремєєв В.С., Кузьмінов В.В.
Мелітопольський державний педагогічнийуніверситет
імені БогданаХмельницького,м. Мелітополь
eremeev@mdpu.org.ua

Постановка проблеми. У сучасних технологіях виникає потреба у впровадженні таких новітніх матеріалів, як графен та нанотрубки. Перший з наведених матеріалів представляє собою сукупність двовимірних кристалів вуглецю, другий – одномірних. Дослідження коливальних процесів у подібних матеріалів має теоретичний інтерес. Найпростіша математична модель у цих системах може бути побудована на основі ланцюжка математичних маятників,, що відкриває можливість вивчення коливального спектра кристала і утворення дефектів у кристалічній решітці.

Аналіз останніх досліджень. Як відомо, середня температура деякого об'єму речовини пропорційна середньому арифметичному кінетичних енергій усіх атомів речовини, що належать цьому об'єму, причому енергії слід взяти осередненими по досить великому інтервалу часу. Тому задача моделювання зводиться до задачі розповсюдження коливального процесу у одновимірному ланцюжку атомів, між якими діють пружні сили, тобто, системі фізичних маятників.

Мета статті - розглянути найпростіші коливальні системи, сформувати підхід до розв'язання розглянутої проблеми.

Основна частина.

Нехай система представляє собою фізичний маятник [1], розташований горизонтально, до якого прикладена сила F(t), рис.1.

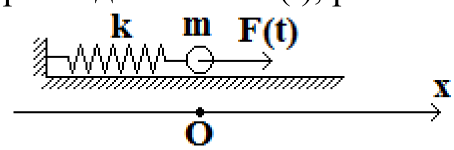

Рис.1. Фізичний маятник.

Згідно другого закону Ньютона

$$m\ddot{x} = \sum_i F_i \qquad 1)$$

рівняння руху для наведеної системи

$$m\ddot{x} = F(t) - kx \qquad 2)$$

Таким чином, задачу знаходження закону руху маси можна сформулювати наступним чином:

Необхідно знайти розв'язок рівняння ,

$$m\ddot{x} + kx = F(t) \qquad 3)$$

при початкових умовах

$$x(0)=x_0,\ \dot{x}(0)=v_0 \qquad 4)$$

Знайдемо спочатку загальний розв'язок рівняння (3). З теорії диференційних рівнянь відомо [2], що загальний розв'язок неоднорідного рівняння є сумою загального розв'язку x_O однорідного рівняння

$$m\ddot{x}+kx=0 \qquad 5)$$

та деякого часткового розв'язку $x^{\sim}$ неоднорідного рівняння (3).
Склавши для рівняння (5) характеристичне рівняння [2],

$$m\lambda^2+k=0$$

отримаємо характеристичні числа

$$\lambda_{1,2}=\pm i\sqrt{\frac{k}{m}}$$

тобто, загальний розв'язок однорідного рівняння

$$x_O=C_1\cos\sqrt{\frac{k}{m}}t+C_2\sin\sqrt{\frac{k}{m}}t \qquad 6)$$

Частковий розв'язок $x^{\sim}$ неоднорідного рівняння (3) будемо шукати у вигляді

$$x^{\sim}=B\int_0^t F(\tau)\sin\left(\sqrt{\frac{k}{m}}(t-\tau)\right)d\tau \qquad 7)$$

Знайдемо похідні

$$\dot{x}^{\sim}=BF(t)\sin\left(\sqrt{\frac{k}{m}}(t-t)\right)+B\sqrt{\frac{k}{m}}\int_0^t F(\tau)\cos\left(\sqrt{\frac{k}{m}}(t-\tau)\right)d\tau=B\sqrt{\frac{k}{m}}\int_0^t F(\tau)\cos\left(\sqrt{\frac{k}{m}}(t-\tau)\right)d\tau$$

$$\ddot{x}^{\sim}=B\sqrt{\frac{k}{m}}\left(F(t)\cos\left(\sqrt{\frac{k}{m}}(t-t)\right)-\sqrt{\frac{k}{m}}\int_0^t F(\tau)\sin\left(\sqrt{\frac{k}{m}}(t-\tau)\right)d\tau\right)=B\sqrt{\frac{k}{m}}F(t)-\frac{k}{m}x^{\sim}$$

$$m\ddot{x}+kx=B\sqrt{km}F(t)-kx^{\sim}+kx^{\sim}=F(t)$$

звідси $B=\dfrac{1}{\sqrt{km}}$, $x^{\sim}=\dfrac{1}{\sqrt{km}}\displaystyle\int_0^t F(\tau)\sin\left(\sqrt{\frac{k}{m}}(t-\tau)\right)d\tau$,

$$\dot{x}^{\sim}=\frac{1}{\sqrt{km}}\int_0^t F(\tau)\cos\left(\sqrt{\frac{k}{m}}(t-\tau)\right)d\tau$$

З останніх рівностей видно, що функція $x^{\sim}$ та її перша похідна при t=0 приймають нульові значення: $x^{\sim}(0)=0,\ \dot{x}^{\sim}(0)=0$.

Остаточно, підставивши у (6) початкові умови (4), отримаємо розв'язок задачі Коші:

$$x=x_0\cos\left(\sqrt{\frac{k}{m}}t\right)+v_0\sqrt{\frac{m}{k}}\sin\left(\sqrt{\frac{k}{m}}t\right)+\frac{1}{\sqrt{km}}\int_0^t F(\tau)\sin\left(\sqrt{\frac{k}{m}}(t-\tau)\right)d\tau$$

Розглянемо систему двох фізичних маятників, з'єднаних послідовно (див. рис. 2)

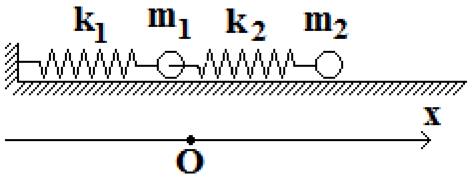

Рис. 2. Система двох послідовних маятників.

Координати та швидкості мас будемо відраховувати від їх власних положень рівноваги. За другим законом Ньютона

$$\begin{cases} m_1 \ddot{x}_1 = -k_1 x_1 + k_2 (x_2 - x_1) \\ m_2 \ddot{x}_2 = -k_2 (x_2 - x_1) \end{cases} \quad 8)$$

Поклавши $\dot{x}_1 = v_1$, $\dot{x}_2 = v_2$, систему рівнянь (8) перетворимо наступним чином

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = v_1 \\ \dot{x}_2 = v_2 \\ \dot{v}_1 = -\dfrac{k_1 + k_2}{m_1} x_1 + \dfrac{k_2}{m_1} x_2 \\ \dot{v}_2 = \dfrac{k_2}{m_2} x_1 - \dfrac{k_2}{m_2} x_2 \end{cases} \quad 9)$$

Складемо характеристичне рівняння [2]

$$\begin{vmatrix} -\lambda & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -\lambda & 0 & 1 \\ -\dfrac{k_1 + k_2}{m_1} & \dfrac{k_2}{m_1} & -\lambda & 0 \\ \dfrac{k_2}{m_2} & -\dfrac{k_2}{m_2} & 0 & -\lambda \end{vmatrix} = 0 \quad 10)$$

або, після спрощення лівої частини, отримаємо

$$\lambda^4 + \left(\frac{k_2}{m_2} + \frac{k_1 + k_2}{m_1} \right) \lambda^2 + \frac{k_1 k_2}{m_1 m_2} = 0 \quad 11)$$

Це біквадратне рівняння, його корені

$$\lambda_{1..4} = \pm \frac{i}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{k_2}{m_2} + \frac{k_1 + k_2}{m_1} \pm \sqrt{\left(\frac{k_2}{m_2} + \frac{k_1 + k_2}{m_1} \right)^2 - \frac{4 k_1 k_2}{m_1 m_2}}} \quad 12)$$

Загальний розв’язок системи (9):

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = C_1 \begin{pmatrix} \gamma_{11} \\ \gamma_{21} \\ \gamma_{11} \\ \gamma_{21} \end{pmatrix} e^{\lambda_1 t} + C_2 \begin{pmatrix} \gamma_{12} \\ \gamma_{22} \\ \gamma_{12} \\ \gamma_{22} \end{pmatrix} e^{\lambda_2 t} + C_3 \begin{pmatrix} \gamma_{13} \\ \gamma_{23} \\ \gamma_{13} \\ \gamma_{23} \end{pmatrix} e^{\lambda_3 t} + C_4 \begin{pmatrix} \gamma_{14} \\ \gamma_{24} \\ \gamma_{14} \\ \gamma_{14} \end{pmatrix} e^{\lambda_4 t}$$

де λ_i - відповідні власні числа (12), $(\gamma_{1i}, \gamma_{2i}, \gamma_{3i}, \gamma_{4i})$ - відповідні власні вектори, що задовольняють однорідній лінійній системі алгебраїчних рівнянь

$$\begin{cases} -\lambda_i \gamma_{1i} + \gamma_{3i} = 0 \\ -\lambda_i \gamma_{2i} + \gamma_{4i} = 0 \\ -\dfrac{k_1 + k_2}{m_1}\gamma_{1i} + \dfrac{k_2}{m_2}\gamma_{2i} - \lambda_i \gamma_{3i} = 0 \\ \dfrac{k_2}{m_2}\gamma_{1i} - \dfrac{k_2}{m_2}\gamma_{2i} - \lambda_i \gamma_{4i} = 0 \end{cases}$$

Як бачимо, вже у випадку двох мас навіть для вільних коливань системи аналітичні вирази стають дуже громіздкими. У випадку n мас характеристичне рівняння системи має 2n – й ступінь, і його точне розв’язання при n>2 стає неможливим. Тому для обчислення коливального процесу систем застосовують чисельні методи, зокрема, метод Рунге-Кути [3] розв’язання системи диференційних рівнянь.

Висновки. Коливання атомів у кристалічних решітках визначають фізичні і механічні властивості матеріалів [1], тому математичне моделювання коливальних процесів має практичне і теоретичне значення. Математична модель коливань може бути побудована на основі системи одновимірних математичних маятників. На прикладі системи з двох маятників, формули (9), показано можливість отримання системи рівнянь, яка цілком вирішувана з використанням чисельних методів [3].

Література

1. Савельев И.В. Курс общей физики, том I. Механика, колебания и волны, молекулярная фізика. М. :Наука, 1970. – 504с.
2. Степанов В.В. Курс дифференциальных уравнений. 6 изд. / В.В. Степанов – Москва: Наука, 1950. – 473 с.
3. Бахвалов Н. С., Жидков Н. П., Кобельков Г. М. Численные методы. – М.: Бином, 2001 — с. 363—375.

***Анотація.* В** статті розглянуто проблему моделювання коливальних процесів в одновимірному кристалі, який розглядається як система математичних маятників. Математична модель процесу представлена у вигляді системи диференціальних рівнянь, кожне з яких описує коливання одновимірного фізичного маятника в околі вузла решітки. На прикладі розгляду двох математичних маятників запропоновано метод розв’язання задачі, яке може бути реалізовано з використанням чисельних методів.

Ключові слова: коливання; кристалічна решітка; математична модель; математичний маятник; фізичний маятник.

Аннотация. В статье рассмотрена проблема моделирования колебательных процессов в одномерном кристалле, который рассматривается как система математических маятников. Математическая модель представлена в виде системы дифференциальных уравнений, каждое из которых описывает колебания одномерного физического маятника в окрестности узла решетки. На примере рассмотрения двух математических маятников предложен метод решения задачи, которое может быть реализовано с использованием численных методов.

Ключевые слова: колебания; кристаллическая решетка; математическая модель; математический маятник; физический маятник.

Abstract. In the article the problem of modeling oscillatory processes in one-dimensional crystal, seen as the pendulum system. The mathematical model of the process is presented in the form of differential equations, each of which describes one-dimensional physical pendulum oscillation in the vicinity lattice site. For example, consider two pendulum the method of solving the problem, which can be implemented using numerical methods.

Keywords: fluctuations; crystal lattice; Mathematical model; pendulum; physical pendulum.