**МИНОБРНАУКИ РОССИИ**

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого

Институт прикладной математики и механики

Кафедра теоретической механики

Работа допущена к защите

Зав. кафедрой, д.ф.-м.н., проф.

**\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ А. М. Кривцов**

"\_\_"\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

**ВЫПУСКНАЯ РАБОТА БАКАЛАВРА**

**Тема:**

**Нелинейные плоские волны в материале с квадратной решёткой.**

Направление: 010900 - Прикладные математика и физика

Выполнил студент гр. 43604/1 \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ Осокина А.Е.

Руководитель: к.-ф.-м.н., доц.каф. \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ Беринский И.Е.

Санкт-Петербург

2015

Введение 3

Цель и задачи работы 5

Неустойчивая решётка. 6

Однополевая модель. 6

Неустойчивая решётка. 9

Двухполевая модель. 9

Устойчивая решётка. 12

Однополевая и двухполевая модели. 12

Четырёхполевая модель. 15

Неустойчивая решётка. 15

Четырёхполевая модель. 18

Устойчивая решётка. 18

Заключение 20

Список литературы 21

# 

# Введение

Исследования в области описания динамики распространения плоских волн в различных кристаллических решётках связаны, в первую очередь, с именем М.Борна, чьи работы датируются началом XX века и не теряют актуальности и по сей день в связи с развитием нанотехнологий и наноэлектроники. Так, задача о распространении линейной волны в одномерной моноатомной цепочке является классической [1],[2]. Модификации этой задачи, а также её обобщения на двумерные решётки рассматривались множеством учёных, в частности, в работах [3], [4]. В работе [5] рассматривалось распространение нелинейных плоских волн в треугольной решётке.

Необходимость построения многополевых моделей при описании распространения волн обусловлена тем, что при континуальном описании не учитываются физические эффекты, связанные с внутренней структурой материала. Построение подобных моделей даст возможность рассматривать системы с учётом информации структурного уровня, не отказываясь при этом от преимуществ континуальных моделей: например, двухполевая модель, в отличие от однополевой, позволяет рассматривать короткие волны.

При построении многополевых моделей дополнительно к полю перемещений для описания изменений, происходящих в рассматриваемой решётке/структуре вводятся системы нескольких взаимопроникающих полей. Для этого выбирается макроячейка моделируемой системы. В зависимости от того, какую модель необходимо построить, выбирается либо минимальная ячейка периодичности (в случае однополевой модели), либо, в случае многополевого подхода, базовая ячейка периодичности может включать несколько элементарных. Особенностью многополевого подхода является то, что, несмотря на идентичность частиц, решётка разбивается на N взаимопроникающих подрешёток, которые маркируются индексами от 1 до N, где N-количество полей. [6]

Актуальность построения подобных моделей для различных, в частности, квадратных, кристаллических решёток, состоит в желании описывать свойства материалов, которые в массе своей синтезируются искуственно – метаматериалов.

Метаматериалы выделены в отдельный класс материалов, так как их свойства зависят от структуры компонентов, упорядоченных особым образом, и могут кардинально отличаться от свойств составляющих их компонентов. Существуют метаматериалы с многократно увеличенными электрической проницаемостью и магнитной восприимчивостью, метаматериалы, эффективность нелинейных эффектов в которых увеличивается на много порядков по сравнению с обычными веществами. Примером могут послужить ауксетики, обладающие полезными механическими свойствами, такими как значительное поглощение механической энергии и высокое сопротивление разрушению.

Хотя возможность управления структурой компонентов материала дает новую степень свободы в конструировании их свойств, однако настоящую революцию произвели работы, продемонстрировавшие возможность создания метаматериалов со свойствами, которые не встречаются в природных материалах. Например, с отрицательным коэффициентом преломления, у которых одновременно отрицательны диэлектрическая и магнитная проницаемости.

Для описания распространения волн в подобных материалах могут использоваться построенные в данной работе модели.

# Цель и задачи работы

Целью данной работы является описание динамики плоских волн в материале, который на микроуровне представляет собой квадратную решётку с одинаковым типом частиц. Рассматриваются квадратные решётки (Рис.1, 2), для которой в работе [7] получены уравнения движения.

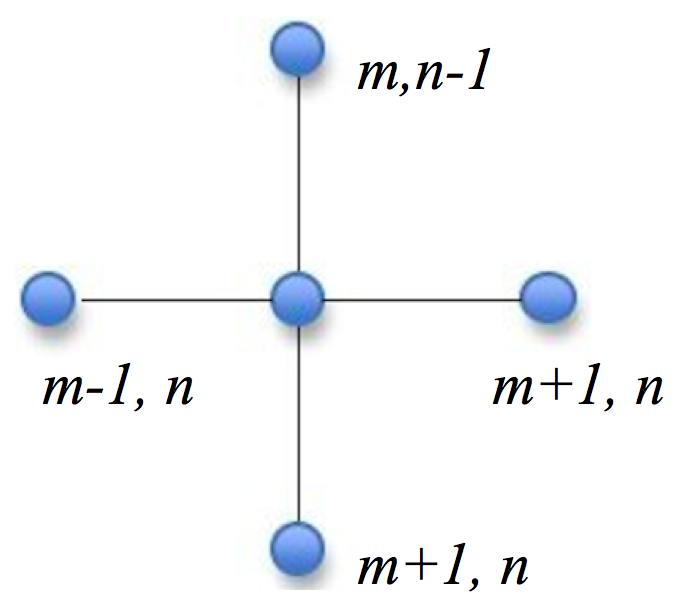
Были решены задачи построения однополевых и многополевых (двух- и четырёхполевых) моделей для обеих решёток.

Рис.2 Упрочнённая (устойчивая) квадратная решётка

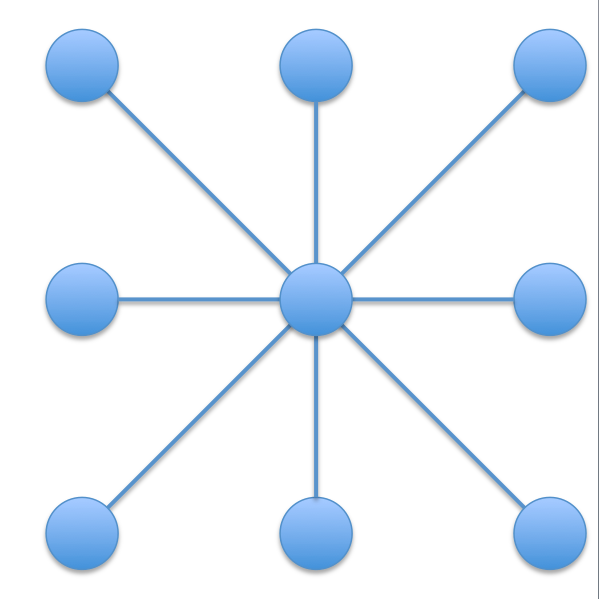


Рис.1. Простая (неустойчивая) квадратная решётка

В работах [3] и [5] показано, что дисперсионный анализ позволяет выделить 2 разных спектра колебаний частиц, высокочастотный и низкочастотный. В случае низкочастотных колебаний все частицы на графике зависимости перемещения от времени лежат на одной гладкой кривой. В этом случае континуальные уравнения можно получить разложением в ряд Тейлора. Такой подход получил название однополевой модели, который совпадает с классическим микрополярным описанием.

В случае высокочастотных колебаний зависимость перемещений от времени является быстро меняющейся функцией, поэтому нельзя провести стандартную процедуру разложения в ряд. Однако если разделить все частицы на чётные и нечётные [3] и рассматривать колебания этих групп отдельно, то для каждой из них станет возможным разложение в ряд.

При исследовании движения частиц в решётках подразумевается, что атомы можно считать материальными точками, соединёнными между собой линейными пружинами.

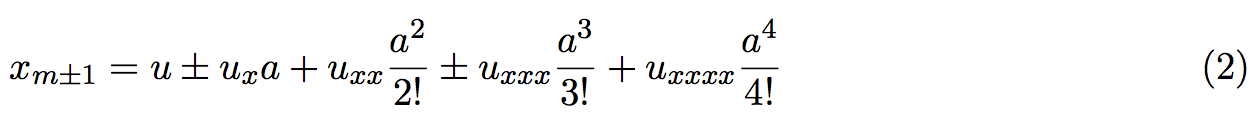
# Неустойчивая решётка.

## Однополевая модель.

Рассмотрим квадратную решётку с периодом *а.* Рассматривается взаимодействие центральной частицы c четырьмя соседними частицами:

. Взаимодействие между частицами с одинаковыми массами *m* моделируется посредством пружин жесткостью *С.* Рассмотрим распространение плоской волны , полагая *ym* = 0. Тогда уравнение для центральной частицы будет иметь вид:

 (1)

Представим смещение по горизонтали как непрерывную функцию *u(x, t).* Разложим смещения соседних с центральной *m* частиц в ряд Тейлора: (2)

Подставив разложение в определяющее уравнение, получим:

 (3)

Для того, чтобы решить данное уравнение, будем искать решение в виде бегущей волны, для чего необходимо прибегнуть к следующей замене [5]:

*,* где -фазовая скорость.

Решением будет являться функция:

, (4)

где -константы, зависящие от граничных условий, а

Дисперсионное соотношение для неустойчивой решётки при *ym* = 0 совпадает с соотношением для одноатомной цепочки:

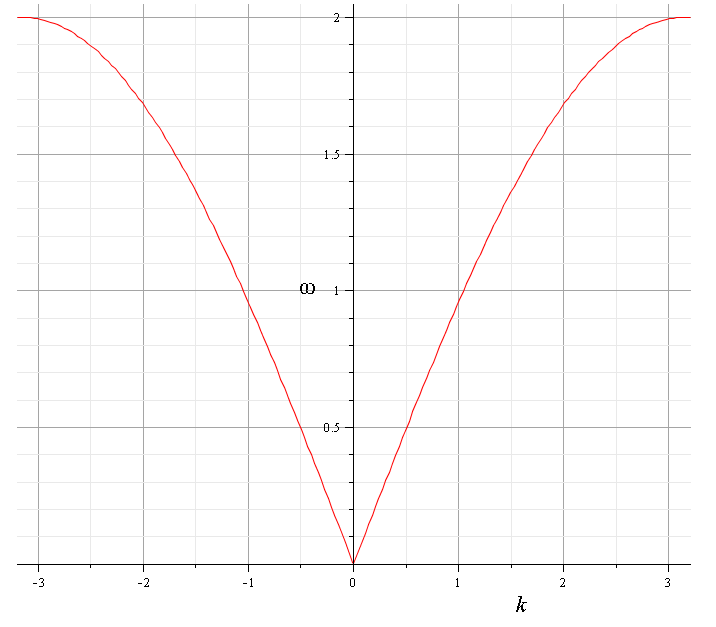


Рис.3

# Неустойчивая решётка.

## Двухполевая модель.

Нумерация производится в соответствии со схемой:

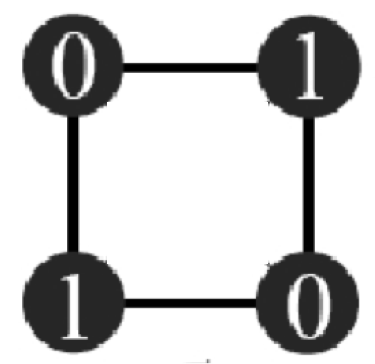
****

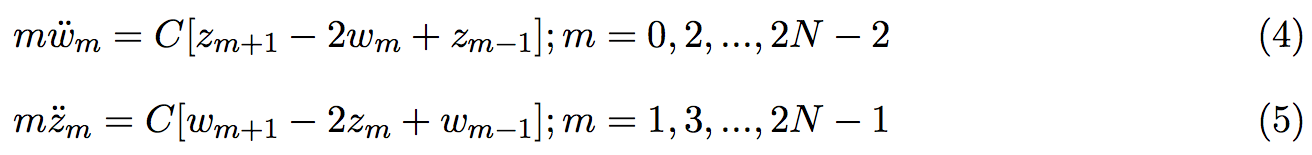
Рис.4

Положим в уравнении (1) за *w* смещение чётных частиц, *z*- нечётных.

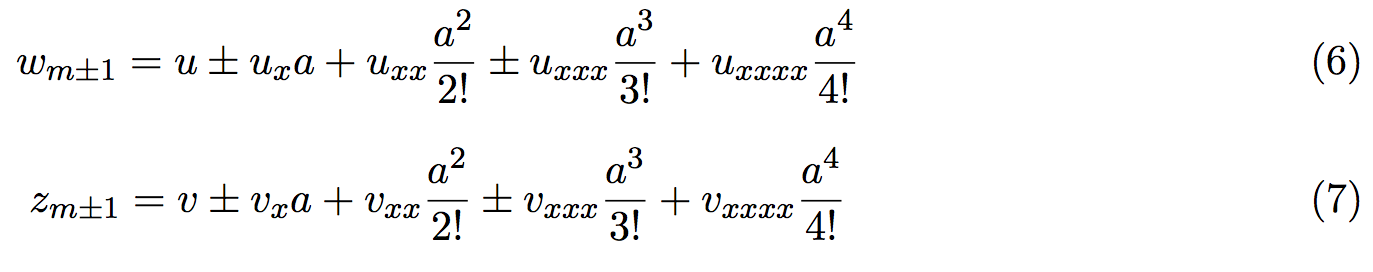
Уравнения динамики будут иметь следующий вид:

(5)

(6)

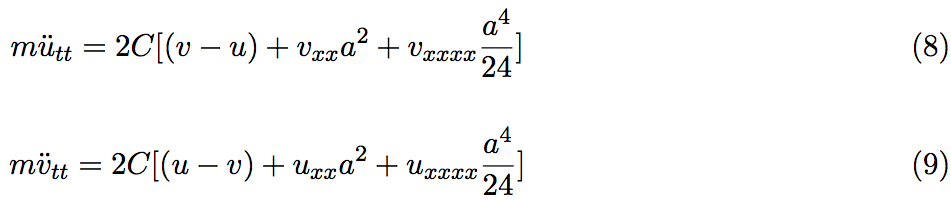


Положим *wm*= *u(x, t) , zm = v(x, t)* Разложения смещений соседних c *(m,n)* частиц в ряд Тейлора для каждой компоненты примут вид:

После подстановки разложений (7), (8)в уравнения (5), (6), получим:

(7)

(8)



(9)

(10)

Чтобы получить решение, введём новые переменные:

и

Нетрудно видеть, что если положить *u=v,* останется только акустическая компонента (U) , а если *u=-v* — оптическая (V)*.* Таким образом, из (8) и (9) получим:

(11)

(12)

Тогда первое уравнение аналогично уравнению (3) однополевой модели, а решением второго при замене [5] является функция:

, где - константы, (13)

а — корни уравнения:

, где:

Дисперсионное соотношение для двухполевой модели:



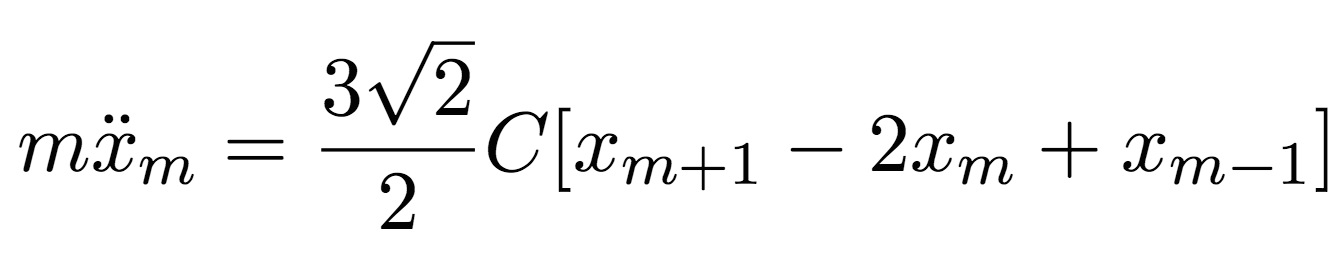
Рис.5

Если сравнить полученные уравнения для однополевой и двухполевой моделей, можно увидеть, что первое уравнение двухполевой модели совпадает с уравнением однополевой. Это значит, что двухполевая модель содержит классическую микрополярную (однополевую) и ведёт себя так же при описании длинных волн, но дополняет и уточняет её при описании коротковолновых эффектов.

# Устойчивая решётка.

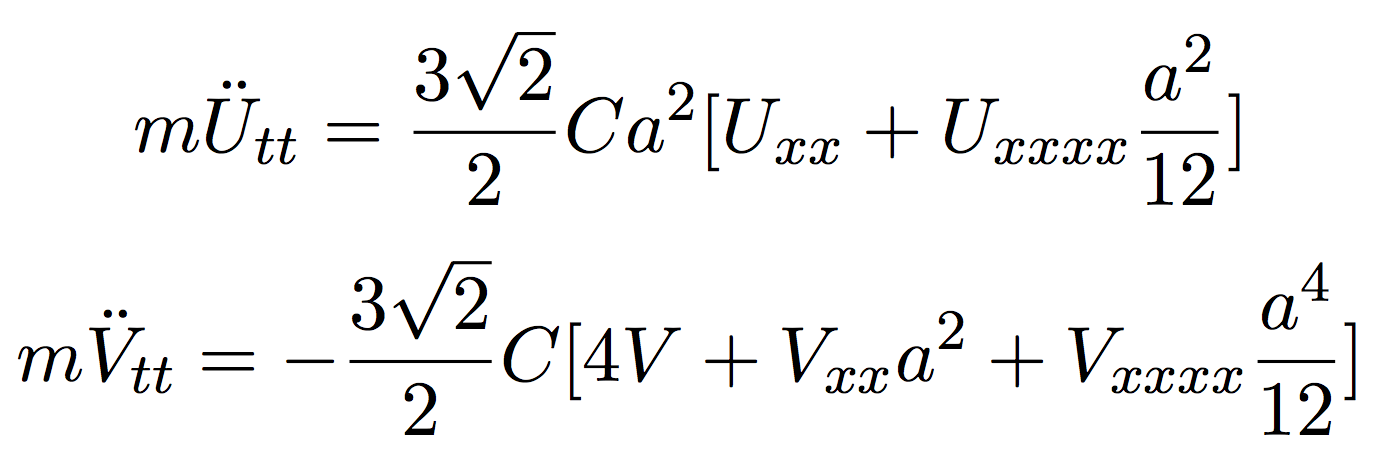
## Однополевая и двухполевая модели.

Вывод уравнений проводится по аналогии с неустойчивой решёткой.



(14)

Замена переменных приводит к следующим уравнениям:

****

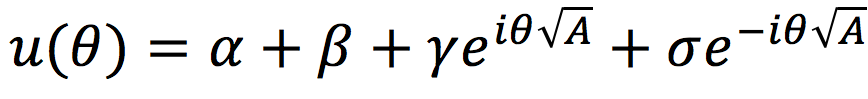
(15)

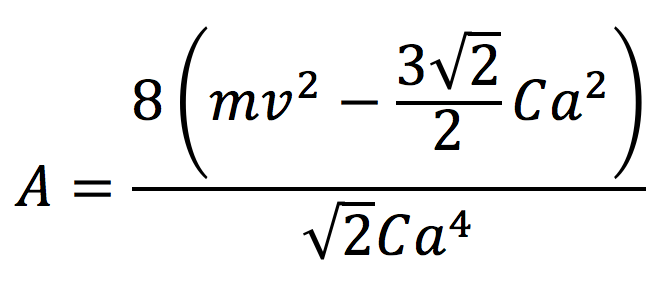
(16)

Решение уравнений аналогично решениям для однополевой и двухполевой моделей для неустойчивой решётки, с приведёнными ниже отличиями.

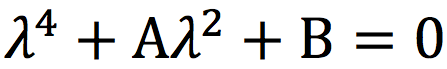
Отличия:

* показатель степени А для однополевой модели:

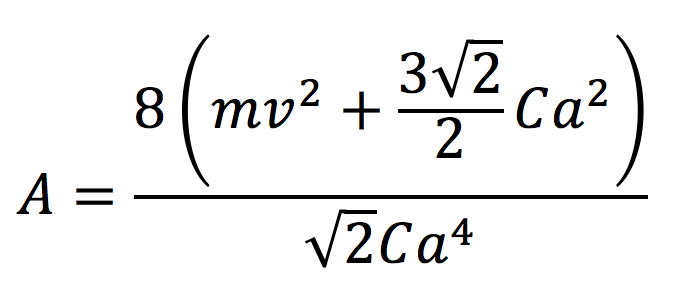




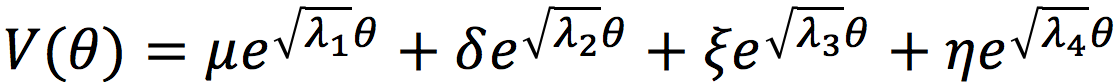
* Корни уравнения для двухполевой модели:



Т.к. Коэффициент А отличается от соответствующего коэффициента для неустойчивой решётки:



И решение имеет вид:

 (17)

Диперсионное соотношение для однополевой модели имеет вид:

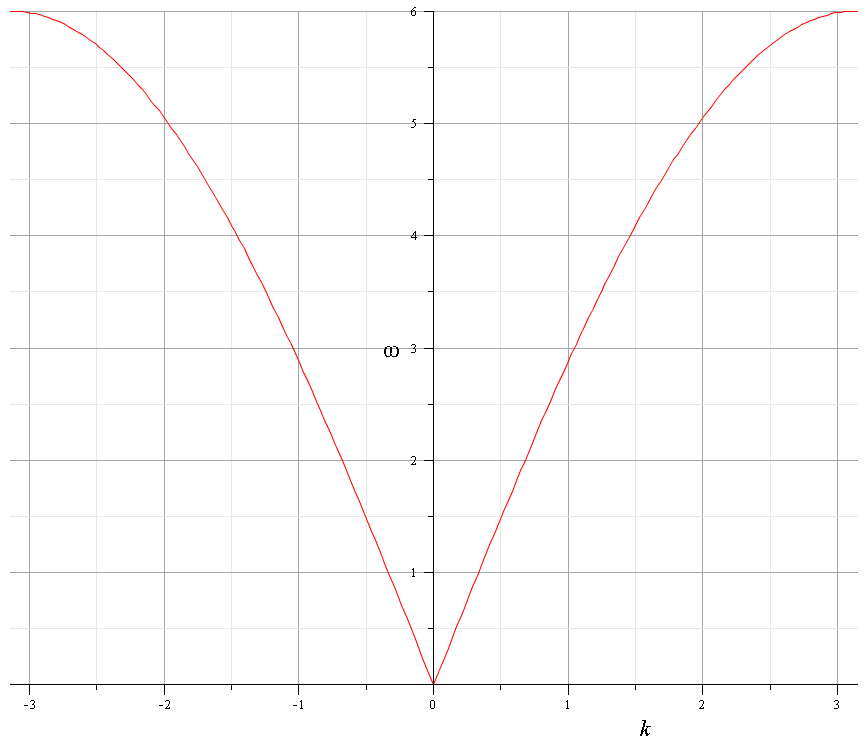


Рис.6

Диперсионное соотношение для двухполевой модели:

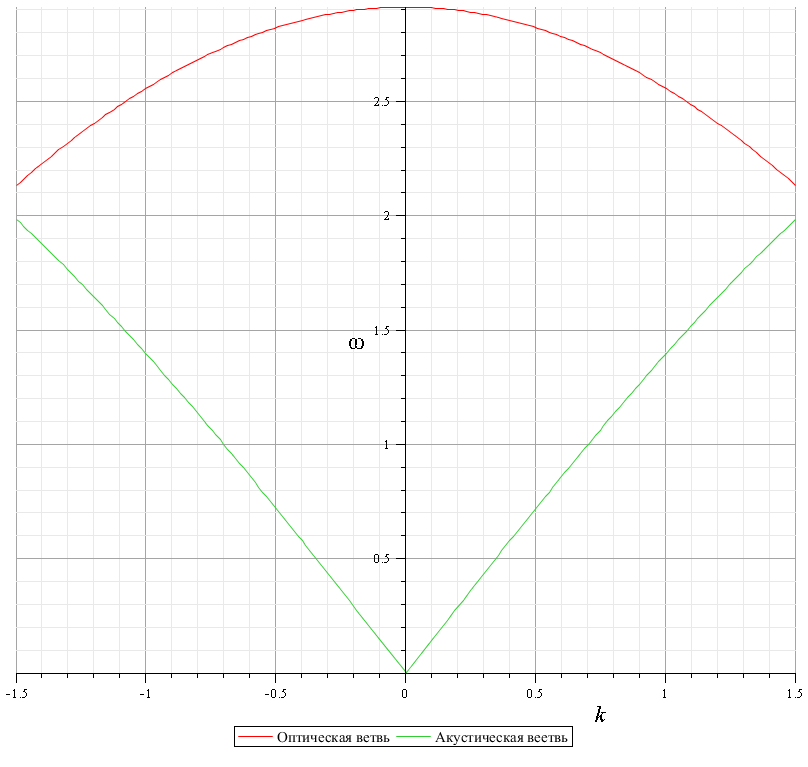
****

Рис.7

Анализ дисперсионных соотношений для устойчивой и неустойчивой решёток показывает, что качественного различия не наблюдается.

Количественные различия заключаются в том, что максимум оптической ветви двухполевой модели устойчивой решётки достигается в точке, в раз превышающей значение максимума двухполевой модели неустойчивой решётки.

Максимум акустической ветви дисперсионного соотношения для неустойчивой решётки достигается в точке , для устойчивой решётки это значение

# Четырёхполевая модель.

## Неустойчивая решётка.

Четырёхполевая модель реализуется посредством разбиения рассматриваемой системы на четыре подрешётки.

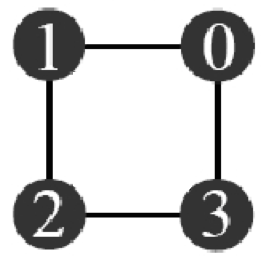
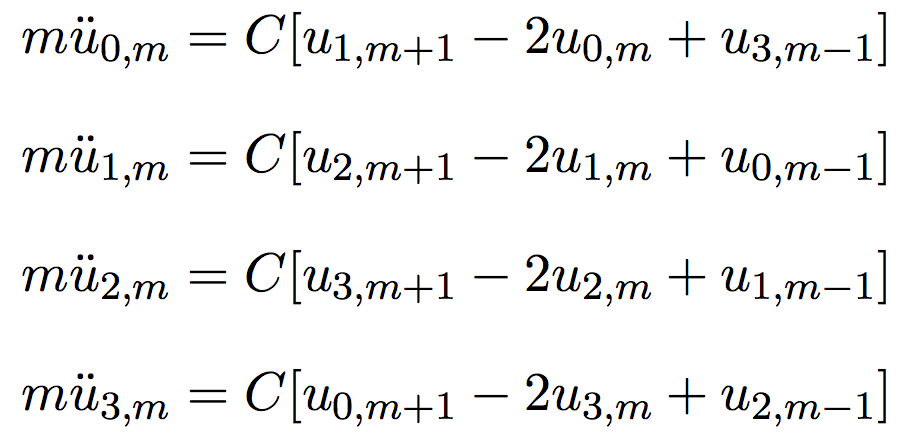


Рис.8

Дискретные уравнения:

(18)

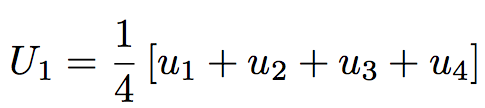
(19)

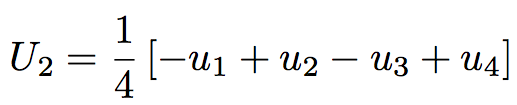


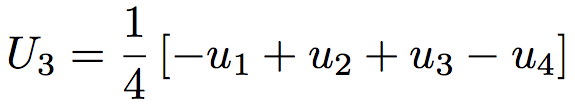
(20)

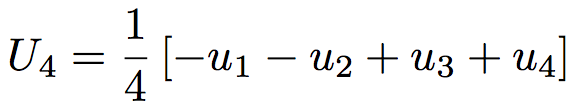
(21)

Замена переменных

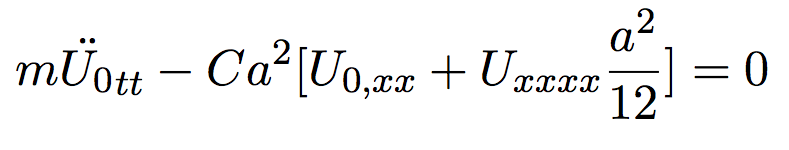


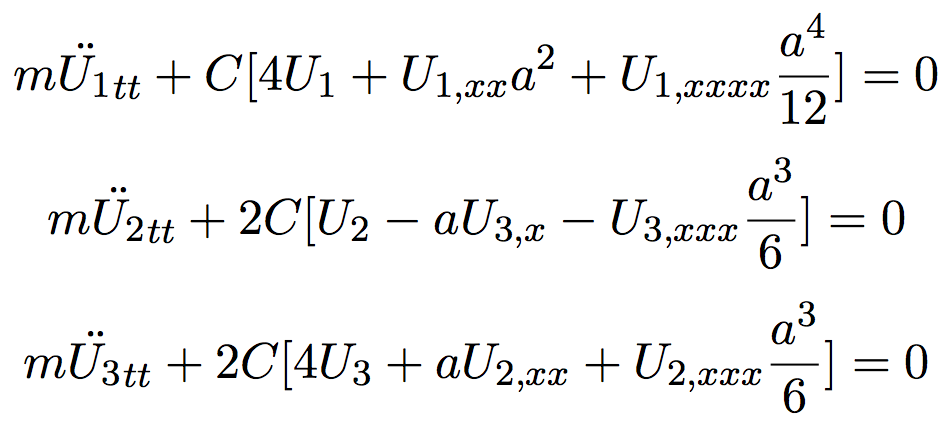






приводит к следующим континуальным уравнениям:





В результате анализа полученнной системы можно сделать следующие выводы:

Четырёхполевая модель содержит в себе двухполевую, и может описывать с достаточно высокой степенью точности как длинноволновое, так и коротковолновое приближения.

Последние два уравнения системы представляют собой уравнения двухполевых моделей, построенные с другим методом выделения подрешёток, в результате чего получаются разные спектры для каждого метода выделения, каждый из которых соответствует разным типам волн, помимо акустических и оптических: например, тепловым.

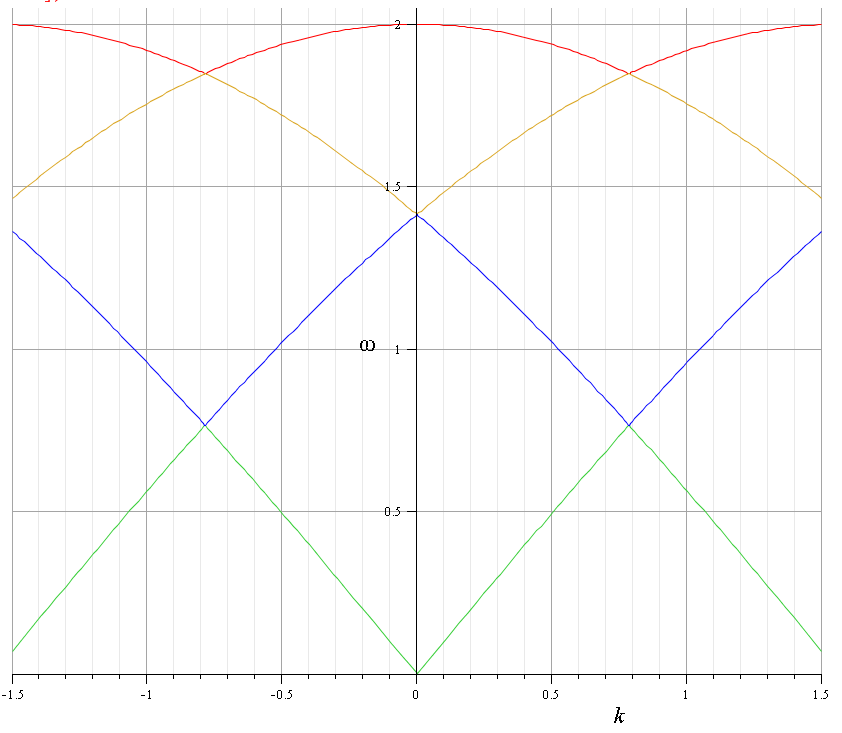


Рис.9. Дисперсионное соотношение для четырёхполевой модели (неуст. решётка)

# Четырёхполевая модель.

## Устойчивая решётка.

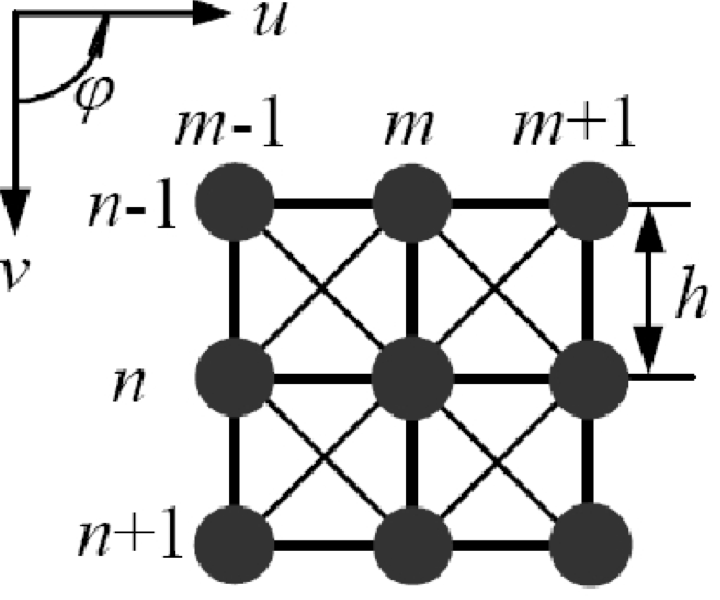
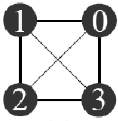
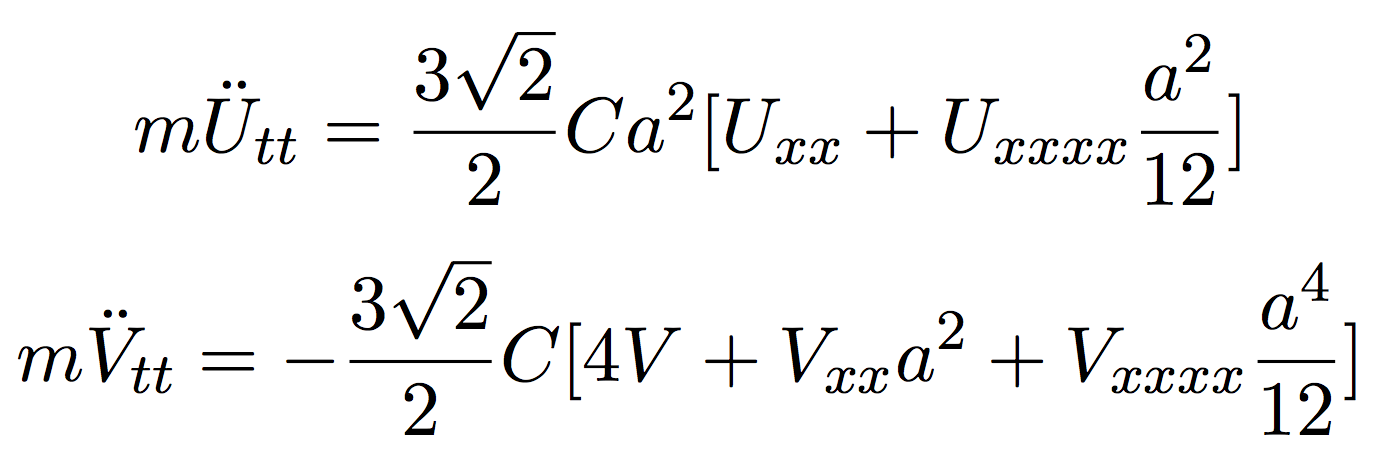
 

Рис.10. Нумерация в случае выделения подрешётки для четырёхполевой модели

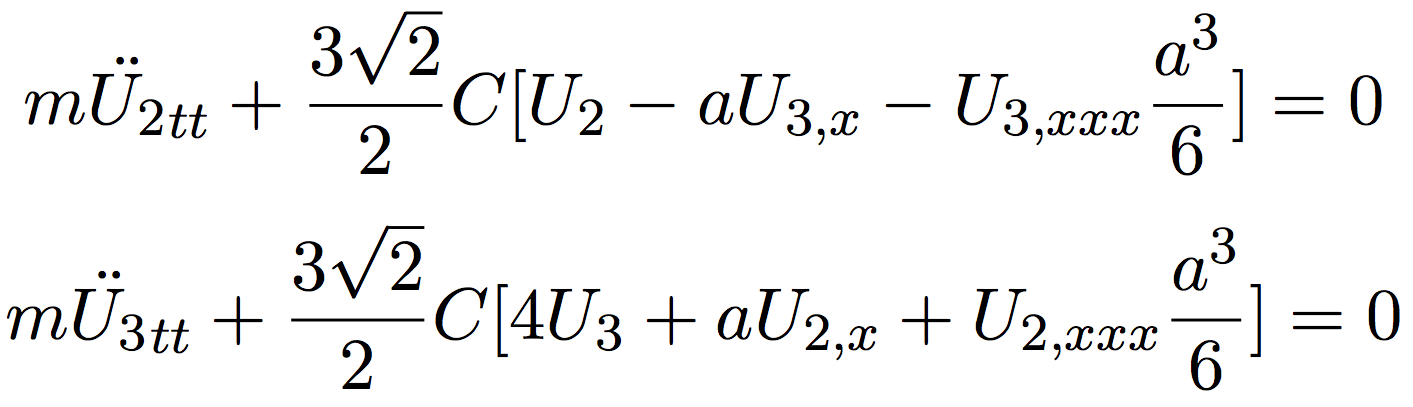
При выводе уравнений нумерация выбиралась так, как показано на рисунке 3.

После действий, аналогичных произведённым в предыдущих пунктах, получим систему:



(22)

(23)



(24)

(25)

Решение первых двух уравнений системы идентично решениям для одно- и двухполевой моделей, решение двух последних будет искаться в численном виде.

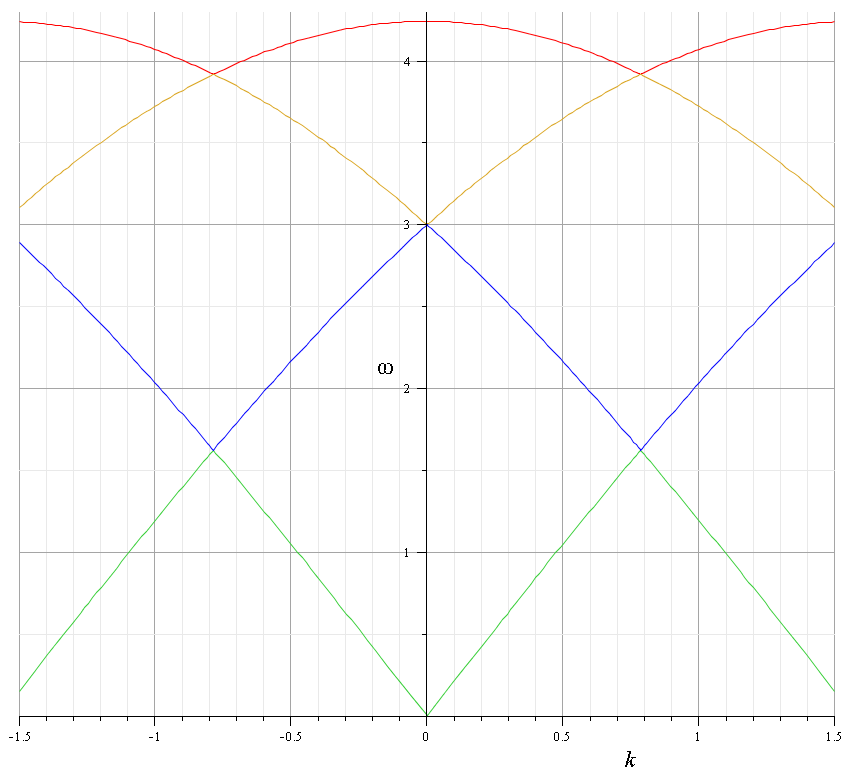
****

Рис. 11. Дисперсионное соотношениедля четырёхполевой модели (уст. решётка)

# Заключение

B результате проведённых исследований были получены уравнения распространения плоских волн в материалах, чья структура описывается моделью квадратной кристаллической решётки. Были рассмотрены два типа квадратных решёток, для каждой построены многополевые модели, в которых показано, что они применимы для моделирования длинноволновых эффектов, т.к. содержат в себе однополевую (классическую) модель, и при этом уточняют её при рассмотрении коротковолновых эффектов.[8]

Четырёхполевая модель объединяет уравнения классической однополевой модели и уравнения двухполевых моделей, построенные с разными методами выделения подрешёток, и может быть использована для описания разных типов волн, как коротких, так и длинных.

Сравнение результатов, полученных для устойчивой и неустойчивой решёток показало, что качественных различий в уравнениях не наблюдается.

**Основные планируемые результаты**

Планируется переход к более сложным решёткам (с разными типами частиц, с пружинами разной жёсткости, etc), а также получение численных результатов для четырёхполевых моделей для обеих типов решёток.

# Список литературы

1. М.Борн, Х.Кунь «Динамическая теория кристаллических решёток» М.: Издательство иностранной литературы, 1958. С.70-77
2. А Н.Ашкрофт, Н.Мермин. «Физика твёрдого тела» М.: Мир, 1979. (том 2) С. 122-130.
3. N. Zabusky, G. Deem. «Dynamics of nonlinear lattices» Journal of computational physics, V.2, 1967. P.126-131.
4. A.V.Porubov, I.V.Andrianov «Nonlinear waves in diatomic crystals» [Wave Motion](http://www.sciencedirect.com/science/journal/01652125) V.50, Issue 7, 2013, P. 1153–1160.
5. A.V. Porubov, I.E. Berinskii.«Nonlinear plane waves in materials having hexagonal structure» International Journal of Non-Linear Mechanics, [V. 67](http://www.sciencedirect.com/science/journal/00207462/67/supp/C), 2014. P. 27–33.
6. А.А. Васильев, А.Е. Мирошниченко. «Алгоритм построения иерархической системы многополевых моделей среды Коссера.» 2007. Стр.5-10.
7. А.Е. Осокина, И.Е. Беринский. «Уравнения динамики треугольной и квадратной кристаллических решёток» [Неделя науки СПбГПУ](http://week-science.spbstu.ru/conf2013/). [Материалы конференции](http://week-science.spbstu.ru/upload/file/iamm.pdf), 2014. C. 241.
8. А.А. Васильев, А.Е. Мирошниченко. «Дискретная и обобщённо-континуальная микрополярные модели плоской структурной системы в задаче устойчивости.» С.29-34.