

## ИЗУЧЕНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ УПРУГИХ ПОВЕРХНОСТНЫХ ВОЛН В УСЛОВИЯХ БЛИЗКИХ К РЕЗОНАНСУ

© 2010 Ю. А. Фадеев, Е. В. Салтанова

*Кузбасский государственный технический университет, ул. Весенняя 28, 650026 Кемерово, Россия*

Поступила в редакцию: 24.09.2009 г.

**Аннотация.** В статье рассмотрено распространение упругих волн на поверхности кристалла с использованием мембранной модели. Изучалось взаимодействие между осцилляторами на поверхности мембраны с учетом их механических свойств. Показано, что при использовании метода сеток можно рассчитать условия передачи механической энергии от одного осциллятора к другому.

**Ключевые слова:** модель мембраны, поверхностные волны, гармонический осциллятор, метод сеток.

### ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время внимание к изучению частично неупорядоченных систем обусловлено тем, что в реальных условиях нет идеальных кристаллических структур. Кристаллы обладают структурными дефектами, которые (даже в малой концентрации) оказывают существенное влияние на свойства кристаллов, такие как прочность, теплопроводность, пластическое деформирование и т.д. Дефекты структуры можно рассматривать как беспорядок, т.е. сложное, нерегулярное в пространстве распределение каких либо элементов (или структур). Такие виды беспорядка являются достаточно традиционным объектом исследования и анализируются методами статистической физики [1—3]. Не меньший интерес вызывает и изучение распространения акустических фононов в двумерной решетке, которые получили название волны Рэлея [4]. Примерами тому могут являться пленочные объекты или поверхности матриц инертных материалов с включенными атомами иных соединений или молекул. ИК- и КР- спектроскопические исследования показали, что между адсорбированными атомами и молекулами в низкотемпературных матрицах инертных газов возникают резонансные явления, которые приводят к расщеплению колебательных полос (матричные эффекты). Одной из причин снятия вырождения, на наш взгляд, являются взаимодействия адсорбированных атомов и молекул в условиях близких к резонансным [5]. Ранее было установлено [6], что в прямоугольной решетке для описания спектра

нормальных волн недостаточно учитывать взаимодействие только между ближайшими соседями, т.к. такое взаимодействие приводит к вырождению в спектре нормальных волн. Для снятия вырождения необходимо дополнительно учитывать «диагональные» взаимодействия. В результате учета такого вида взаимодействий при определенных параметрах потенциала взаимодействия атомов возможно возникновение сильной анизотропии спектров нормальных волн.

В качестве реальных объектов имеющих сетчатую структуру в виде правильных шестиугольников могут быть молекулярные кристаллы, такие как пирен, коронен и др. и кристаллы с водородными связями [7] или полимерные соединения, такие как салегенин [8]. Особенностью таких соединений является то, что его молекулы способны образовывать цепочные ассоциаты с водородными связями, и поверхностный слой кристаллической структуры таких соединений можно рассматривать как мембрану, которая не сопротивляется изгибу и сдвигу. Если под действием внешнего импульса возбудить колебания такой мембраны, то по поверхности кристалла распространяются фононные волны определенных амплитуд и частот. Атомы физически адсорбированного вещества также совершают колебания, но с другой амплитудой и частотой. При решении задачи колебаний мембраны в работах [9—11] были использованы модели мембраны для изучения распространения упругих волн по поверхности однородных пленок или по поверхности квазиоднородных сред. В работе рас-

сматривались мембраны, образованные углеводородными соединениями. Каркас сетки мембраны в основном составлен из атомов углерода. В качестве адсорбированных веществ рассматривались простейшие молекулярные соединения, такие как  $O_2$ ,  $N_2$ , при этом получали, что масса атомов и молекул в 2—2,5 раза больше массы атомов мембраны. Для решения задач использовался метод связанных гармонических осцилляторов [12].

### ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ

Модель мембраны представляет собой упругую пленку, положение которой в пространстве задается координатами узлов сетки с их шестиугольным расположением (рис. 1). На модели узлы сетки моделируют положение атомов, а линии сетки — элементы связи атомов. Положение узлов по координатным осям принималось неизменным. Положения молекул на мембране задавалось таким образом, чтобы абсцисса и ордината его центра были равны соответствующим координатам выбранного узла сетки. Адсорбированные молекулы и узлы сетки, над которыми они располагаются, рассматриваются как связанные осцилляторы.

Для упрощения расчетов положения мембраны на шестиугольную сетку была наложена прямоугольная с разным шагом по обеим координатам (рис. 2).

Рассматриваем мембрану прямоугольной формы. Мембрана расположена на плоскости  $Oxy$  и занимает область:  $0 \leq x \leq 0,01$  м,  $0 \leq y \leq 0,01$  м и закреплена на границе этой области. Мембрана совершает малые поперечные колебания, т.е. если точка мембраны имеет в положении равновесия абсциссу  $x$  и ординату  $y$ , то она имеет те же абсциссу и ординату во всем процессе колебания, меня-

ется только аппликата  $u$ . Задача заключается в том, чтобы найти закон колебания мембраны, то есть найти функцию  $u = u(x, y, t)$ , которая описывает отклонение мембраны в любой точке  $(x, y)$  в любой момент времени.

Как известно уравнение свободных колебаний мембраны удовлетворяет уравнению [13]:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = a^2 \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right), \quad (1)$$

где  $a$  — коэффициент жесткости мембраны. Решение уравнения (1) проводим при заданных начальных условиях:

$$\left. \begin{aligned} u(x, y, 0) &= 0 \\ \frac{\partial u}{\partial t}(x, y, 0) &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

и граничных условиях:

$$\left. \begin{aligned} u(0, y, t) &= 0, & u(0, 0, 1, y, t) &= 0, \\ u(x, 0, t) &= 0, & u(x, 0, 0, 1, t) &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

Для решения уравнения (1) был выбран метод сеток, основанный на дискретизации, полученного решения. Если рассматривать функцию  $u(x, y, t)$  только в узлах сетки, то частную производную можно записать в форме:

$$\frac{\partial u(x, y, t)}{\partial x} \approx \frac{U_{i,j,k} - U_{i-1,j,k}}{h},$$

где  $U_{i,j,k}$  — дискретное выражение координат точек мембраны; узел  $(i, j, k)$  соответствует точке  $(x, y, t)$ ;  $h$  — шаг дискретизации, равный длине связи между атомами  $1,5 \text{ \AA}$ . Данное выражение называется левой конечной разностью. Частная производная второго порядка имеет вид:

$$\frac{\partial^2 u(x, y, t)}{\partial x^2} \approx \frac{U_{i-1,j,k} - 2U_{i,j,k} + U_{i+1,j,k}}{h^2}. \quad (4)$$

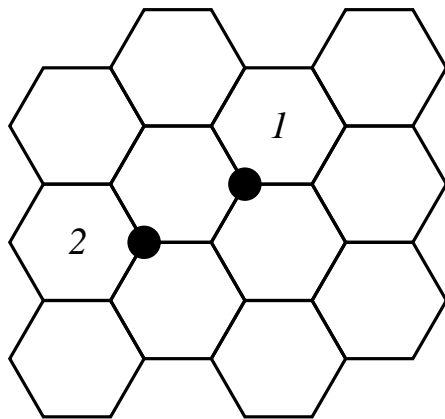


Рис. 1. Модель мембраны с адсорбированными молекулами 1 и 2

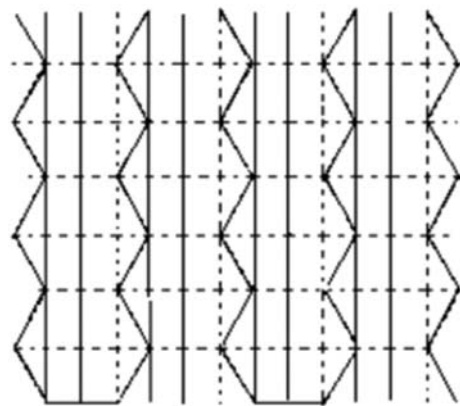


Рис. 2. Прямоугольная сетка, наложенная на шестиугольную

Аналогично можно записать производные по другим переменным. После подстановки (4) в (1) получается выражение:

$$\begin{aligned} & \frac{U_{i-1,j,k} - 2U_{i,j,k} + U_{i+1,j,k}}{t^2} = \\ & = a^2 \left( \frac{U_{i-1,j,k} - 2U_{i,j,k} + U_{i+1,j,k}}{h_1^2} + \right. \\ & \left. + \frac{U_{i,j-1,k} - 2U_{i,j,k} + U_{i,j+1,k}}{h_2^2} \right) \end{aligned} \quad (5)$$

где  $t$  — шаг дискретизации по времени составляет  $10^{-10}$  с;  $h_1, h_2$  — шаг дискретизации по длине связи, 1,5 Å и 2,6 Å, соответственно;  $U$  — координаты точек мембраны в соответствующих позициях. Решая (5) относительно  $U_{i,j,k+1}$ , получаем:

$$\begin{aligned} U_{i,j,k+1} = t^2 \left( \left( \frac{U_{i-1,j,k} - 2U_{i,j,k} + U_{i+1,j,k}}{h_1^2} + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{U_{i,j-1,k} - 2U_{i,j,k} + U_{i,j+1,k}}{h_2^2} \right) a^2 \right) + 2U_{i,j,k} - U_{i,j,k-1}. \end{aligned} \quad (6)$$

Выражение (6) является основой для моделирования положения мембраны в заданный момент времени.

Решение задачи взаимодействия мембраны и атомов проводится следующим образом. Потенциальную и кинетическую энергии системы записывают в виде:

$$\begin{cases} T = \frac{1}{2} m_1 \dot{u}_1^2 + \frac{1}{2} m_2 \dot{u}_2^2 \\ V = \frac{1}{2} k_1 u_1^2 + \frac{1}{2} k_2 u_2^2 + \frac{1}{2} k_3 (u_1 - u_2)^2 \end{cases}$$

где  $u_1$  — координата молекулы адсорбированного вещества,  $u_2$  — координата атома узла мембраны,  $m_1$  — масса молекулы адсорбированного вещества,  $m_2$  — масса узла мембраны,  $k_1$  — жесткость связи,

моделирующей упругость мембраны (0,1 мдин/Å);  $k_2$  — жесткость связи, моделирующей колебания адсорбированной молекулы (9,4 мдин/Å);  $k_3$  — жесткость связи, моделирующей взаимодействие молекулы и атома (9,9 мдин/Å) [14]. Так как рассматриваются только поперечные колебания мембраны с адсорбированными на ней молекулами, то уравнение движения системы (уравнения Лагранжа) имеет вид:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{u}_s} + \frac{\partial V}{\partial u_s} = 0, \quad s = 1; 2$$

или

$$\begin{cases} m_1 \ddot{u}_1 + k_1 u_1 + k_3 (u_1 - u_2) = 0 \\ m_2 \ddot{u}_2 + k_2 u_2 + k_3 (u_1 - u_2) = 0 \end{cases} \quad (7)$$

Используя выражение левой конечной разности (7), можно записать:

$$\begin{cases} m_1 \frac{U_{i-1}^1 - 2U_i^1 + U_{i+1}^1}{h^2} + k_1 U_i^1 + k_3 (U_i^1 - U_i^2) = 0 \\ m_2 \frac{U_{i-1}^2 - 2U_i^2 + U_{i+1}^2}{h^2} + k_2 U_i^2 + k_3 (U_i^1 - U_i^2) = 0 \end{cases}, \quad (8)$$

где  $U^j$  — координаты соответствующих точек, записанных в дискретной форме. Решение системы (8) относительно  $U_{i+1}^1, U_{i+1}^2$  имеет вид:

$$\begin{cases} U_{i+1}^1 = \frac{-m_1 U_{i-1}^1 + 2m_1 U_i^1 - k_1 U_i^1 h^2 - k_3 U_i^1 h^2 + k_3 U_i^2 h^2}{m_1} \\ U_{i+1}^2 = -\frac{m_2 U_{i-1}^2 - 2m_2 U_i^2 - k_2 U_i^2 h^2 - k_3 U_i^1 h^2 + k_3 U_i^2 h^2}{m_2} \end{cases}$$

Результаты моделирования представлены в графическом виде (рис. 3). Таким образом, передача энергии от одной адсорбированной молекулы к другой в условиях близким к резонансным, благодаря существованию поперечных поверхностных волн, зависит как от жесткости связей между ато-

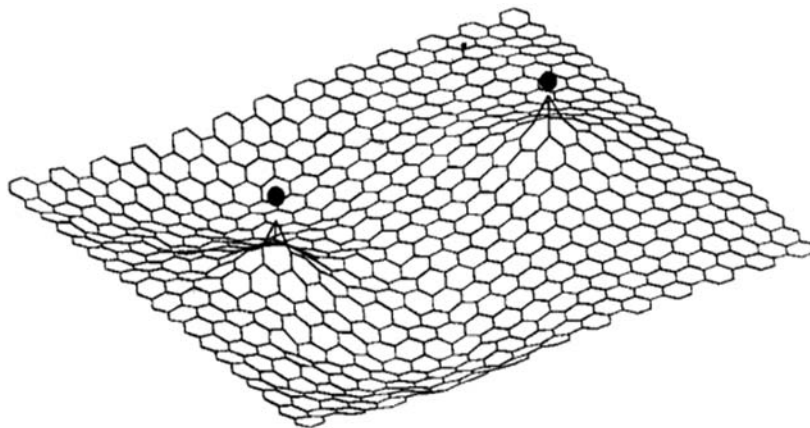


Рис. 3. Поверхностная волна, распространяющаяся на мембране

мами мембраны, так и от взаимодействия между молекулами примеси и атомами мембраны. Усиление взаимодействия в молекулярных кристаллах с понижением температуры может привести к более яркому выражению снятия вырождения частот в колебательных спектрах примесей, что наблюдается в эксперименте.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Займан Дж.* Модели беспорядка. М.: Мир, 1982. 591 с.
2. *Витт Р., Гебалл Т.* Дальний порядок в твердых телах. М.: Мир, 1982. 324 с.
3. *Эфрос А. Л.* Физика и геометрия беспорядка. М.: Наука, 1982. 175 с.
4. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Теория упругости. М.: Наука, 1965. 203 с.
5. *Фадеев Ю. А.* Автореф. дис. Колебательная спектроскопия межмолекулярных взаимодействий и структурно-динамической микрогетерогенности конденсированных сред доктора ф.-м. наук. С.-Пб., 2001. 45 с.
6. *Окомельков А. В.* //Физика твердого тела. 2002. Т. 44. Вып. 10. С. 1888.
7. *Китайгородский А. И.* Молекулярные кристаллы. М.: Наука, 1971. 424 с.
8. *Фадеев Ю. А.* Изучение внутри- и межмолекулярных водородных связей в высокомолекулярных соединениях методами ИК- и КР-спектроскопии. // Вестник Кузбасского технического университета. 2000. № 2. С. 25—27.
9. *Фадеев Ю. А., Салтанова Е. В., Сыркин И. С.* // Материалы Всероссийской научной конференции ВСНКФ-11. Екатеринбург, 2005. С. 146.
10. *Фадеев Ю. А., Салтанова Е. В., Сыркин И. С.* // Международная научно-практическая конференция «Химия 21 век: новые технологии, новые продукты». Кемерово, 2006. С. 157.
11. *Фадеев Ю. А., Салтанова Е. В., Сыркин И. С.* // Вестник Кузбасского технического университета. 2006. № 4. С. 6.
12. *Горелик В. С.* // Неупругое рассеяние света в кристаллах. Труды физического института им. П. Н. Лебедева. 1987. Т. 180. С. 87—127.
13. *Тихонов А. Н., Самарский А. А.* Уравнения математической физики. М.: Наука, 2004. 798 с.
14. Межмолекулярные взаимодействия от двухатомных молекул до биополимеров. Под ред. Б. Пюльман. М.: Мир, 1981. с. 592.

---

*Фадеев Юрий Александрович* — д.ф.-м.н, профессор, зав. кафедрой математики, Кузбасский государственный технический университет; тел.: (3842) 396-318

*Fadeev Y. A.* — grand PhD, professor, head of the mathematics Department, Kuzbass State Technical University; tel.: (3842) 396-318

*Салтанова Елена Владимировна* — ст. преподаватель кафедры высшей математики и медицинской и биологической физики, Кемеровская государственная медицинская академия; тел.: (3842) 549-130; e-mail: saltanovaelena09@rambler.ru

*Saltanova E. V.* — lecturer of the medical and biological physics department, Kemerovo State Medical Academy; tel.: (3842) 549-130; e-mail: saltanovaelena09@rambler.ru