

УДК 534.113

М.А. Бубенчиков

ОБ ИДЕАЛЬНЫХ КОЛЕБАНИЯХ НАНОТРУБОК В ЕСТЕСТВЕННОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ¹

В работе описана гиродинамика нанотрубки, имеющей собственный магнитный момент за счет наличия в ней интеркалированного железа. Рассмотрены идеальные колебания трубки в естественном магнитном поле Земли. Построено аналитическое решение задачи о нелинейных колебаниях трубки. Численно найдены частотные характеристики, отвечающие различному уровню намагниченности.

Ключевые слова: момент инерции, углы Эйлера, собственный магнитный момент, внешнее поле, идеальные колебания, инерционная прецессия.

Эйлерово описание движения

Пусть нанотрубка имеет собственный магнитный момент, направленный по ее оси и имеющий величину μ . Для того чтобы определить влияние магнитного поля на ориентацию системы нанотрубок в пространстве, будем использовать подход Эйлера, хорошо известный в классической механике [1], то есть будем опираться на теорему о моменте количества движения, записанную в главных осях инерции тела для центра масс, и кинематические соотношения, определяющие проекции угловой скорости тела через углы Эйлера и их производные.

Пусть d – диаметр нанотрубки, а l – ее длина. Так как $d \ll l$, то моменты инерции относительно осей Ox и Oy можно принять равными моменту инерции стержня длиной l , взятому относительно оси, проходящей через его центр масс, то есть

$$A = B = \frac{ml^2}{12}. \quad (1)$$

Здесь m – масса нанотрубки.

Момент инерции относительно собственной оси трубки можно принять равным моменту инерции однородного сплошного кругового цилиндра относительно его геометрической оси, то есть положить

$$C = \frac{md^2}{8}. \quad (2)$$

Однако, как будет видно из дальнейшего, эта величина практически не будет оказывать влияния на вращение нанотрубки около ее центра масс.

Самый общий вид кинематических уравнений Эйлера следующий [1]:

$$\left. \begin{aligned} p &= \dot{\psi} \sin \theta \sin \varphi + \dot{\theta} \cos \varphi, \\ q &= \dot{\psi} \sin \theta \cos \varphi - \dot{\theta} \sin \varphi, \\ r &= \dot{\psi} \cos \theta + \dot{\varphi}. \end{aligned} \right\}. \quad (3)$$

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант РФФИ № 08-01-00484-а).

Здесь p, q, r – проекции вектора угловой скорости тела на оси подвижной системы координат $0xyz$; φ – угол собственного вращения; ψ – угол прецессии; θ – угол нутации (см. рис. 1).

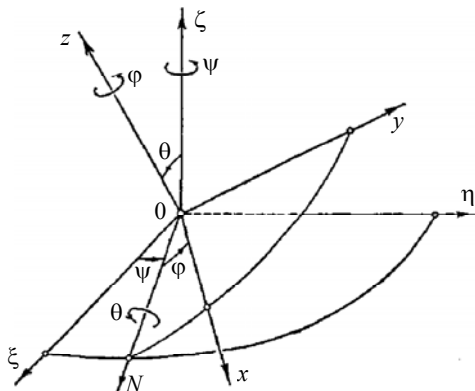


Рис. 1

Динамические же уравнения в рассматриваемом случае будут иметь вид [1]

$$\left. \begin{aligned} A \frac{dp}{dt} + (C - A)qr &= L_x^{(e)}, \\ A \frac{dq}{dt} + (A - C)pr &= L_y^{(e)}, \\ C \frac{dr}{dt} &= L_z^{(e)}. \end{aligned} \right\}. \quad (4)$$

Пусть задано внешнее магнитное поле $\mathbf{B} = (B_\xi, B_\eta, B_\zeta)$. Тогда момент, вращающий нанотрубку, определится следующим образом [2]:

$$\mathbf{L}^{(e)} = \mu [\mathbf{k}, \mathbf{B}]. \quad (5)$$

Здесь μ – собственный магнитный момент трубки, $\mathbf{B}$ – вектор магнитной индукции внешнего магнитного поля, $\mathbf{k}$ – орт оси z , направленной по оси трубки.

Найдем проекции момента внешних сил на оси подвижной системы координат $0xyz$, то есть найдем $L_x^{(e)}, L_y^{(e)}, L_z^{(e)}$. Для этого распишем векторное произведение, выражающее момент внешних сил:

$$\mathbf{L}^{(e)} = \mu [\mathbf{k}, \mathbf{B}] = \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ 0 & 0 & \mu \\ B_x & B_y & B_z \end{vmatrix} = -i(\mu B_y) + j(\mu B_x) + \mathbf{k}(0). \quad (6)$$

$L_x^{(e)} \quad L_y^{(e)} \quad L_z^{(e)}$

Как видим, проекция момента внешних сил на собственную ось вращения $L_z^{(e)}$ оказалась равной нулю. Поэтому третье уравнение (4) дает первый интеграл

$$r = \text{const}. \quad (7)$$

Напомним, что мы изучаем лишь поворот трубки около своего центра масс. Это удобно сделать, введя в рассмотрение две системы координат: одну $0\xi\eta\zeta$, оси которой не меняют своей ориентации в пространстве, другую $0xyz$, жестко связанную с телом и имеющую начало также в центре масс. В данный момент време-

ни каждая из осей подвижной системы составляет определенный угол с тремя осями неподвижной системы отсчета. Таким образом, имеется девять величин, называемых направляющими косинусами, фиксирующих положение подвижных осей относительно неподвижных.

Как известно из аналитической геометрии, декартовы координаты точек в обеих системах связаны равенствами:

$$\begin{aligned}x &= \alpha_1 \xi + \beta_1 \eta + \gamma_1 \zeta, \\y &= \alpha_2 \xi + \beta_2 \eta + \gamma_2 \zeta, \\z &= \alpha_3 \xi + \beta_3 \eta + \gamma_3 \zeta.\end{aligned}\tag{8}$$

Если для определения положения твердого тела в пространстве использовать углы Эйлера φ , ψ , θ (см. рис. 1), то значение упомянутых выше косинусов углов будут следующими [3]:

$$\begin{aligned}\alpha_1 &= \cos \psi \cos \varphi - \sin \psi \sin \varphi \cos \theta, \quad \alpha_2 = -\cos \psi \sin \varphi - \sin \psi \cos \varphi \cos \theta, \\ \beta_1 &= \sin \psi \cos \varphi + \cos \psi \sin \varphi \cos \theta, \quad \beta_2 = -\sin \psi \sin \varphi + \cos \psi \cos \varphi \cos \theta, \\ \gamma_1 &= \sin \varphi \sin \theta, \quad \gamma_2 = \cos \varphi \sin \theta.\end{aligned}\tag{9}$$

Значения α_3 , β_3 , γ_3 мы не приводим, поскольку в дальнейшем они не понадобятся.

Согласно (6), для задания компонент момента внешних сил, входящих в динамические уравнения (4), необходимо выразить значения компонент внешнего магнитного поля B_x , B_y через заданные величины B_ξ , B_η , B_ζ . Следуя формулам (8) и (9), найдем

$$\begin{aligned}B_x &= B_\xi (\cos \psi \cos \varphi - \sin \psi \sin \varphi \cos \theta) + \\ &+ B_\eta (\sin \psi \cos \varphi + \cos \psi \sin \varphi \cos \theta) + B_\zeta \sin \varphi \sin \theta,\end{aligned}\tag{10}$$

$$\begin{aligned}B_y &= -B_\xi (\cos \psi \sin \varphi + \sin \psi \cos \varphi \cos \theta) - \\ &- B_\eta (\sin \psi \sin \varphi - \cos \psi \cos \varphi \cos \theta) + B_\zeta \cos \varphi \sin \theta.\end{aligned}\tag{11}$$

Заметим, что для интегрирования уравнений (3), (4) необходимо задать следующие начальные данные:

$$\begin{aligned}\varphi(0) &= \varphi_0, \quad \psi(0) = \psi_0, \quad \theta(0) = \theta_0, \\ p(0) &= p_0, \quad q(0) = q_0, \quad r(0) = r_0.\end{aligned}$$

Здесь φ_0 , ψ_0 , θ_0 , p_0 , q_0 , r_0 – некоторые константы. Будем считать трубки случайным образом ориентированными в пространстве. Это означает, что φ_0 , ψ_0 , θ_0 будут случайными числами. Имея в виду интеграл (7), получим $r(t) \equiv r_0$.

Для нанотрубок $C \ll A$ это приводит к дальнейшему упрощению динамических уравнений Эйлера.

С учетом сказанного, а также с учетом (7), (10) и (11) уравнения Эйлера (4) можно переписать следующим образом:

$$\begin{aligned}\frac{dp}{dt} &= qr_0 + \frac{\mu}{A} (B_\xi (\cos \psi \sin \varphi + \sin \psi \cos \varphi \cos \theta) + \\ &+ B_\eta (\sin \psi \sin \varphi - \cos \psi \cos \varphi \cos \theta) - B_\zeta \cos \varphi \sin \theta);\end{aligned}\tag{12}$$

$$\frac{dq}{dt} = -pr_0 + \frac{\mu}{A} (B_{\xi} (\cos \psi \cos \varphi - \sin \psi \sin \varphi \cos \theta) + B_{\eta} (\sin \psi \cos \varphi + \cos \psi \sin \varphi \cos \theta) + B_{\zeta} \sin \varphi \sin \theta), \quad r = r_0. \quad (13)$$

Интегрируя уравнения (12), (13) численно совместно с уравнениями (3), например, при нулевых начальных условиях, найдем $\varphi = \varphi(t)$, $\psi = \psi(t)$, $\theta = \theta(t)$, а также $p = p(t)$, $q = q(t)$. Заметим, B_{ξ} , B_{η} , B_{ζ} , входящие в уравнения (12), (13), могут быть функциями времени. Так что по приведенным уравнениям можно исследовать влияние внешнего переменного магнитного поля.

Численное решение задачи

Для численного интегрирования системы ОДУ (12), (13) совместно с системой ОДУ (3) будем использовать метод Рунге-Кутты четвертого порядка точности. Предварительно проведем преобразования уравнений (3). Первое уравнение системы (3) умножим на $\sin \varphi$ и сложим со вторым, умноженным на $\cos \varphi$. Получим

$$p \sin \varphi + q \cos \varphi = \dot{\psi} \sin \theta. \quad (14)$$

Из первого уравнения (3), умноженного на $\cos \varphi$, вычтем второе, умноженное на $\sin \varphi$, получим

$$p \cos \varphi - q \sin \varphi = \dot{\theta}. \quad (15)$$

И, наконец, третье уравнение (3) с учетом полученного интеграла перепишем следующим образом:

$$\dot{\varphi} = r_0 - (p \sin \varphi + \theta \cos \varphi) \operatorname{ctg} \theta. \quad (16)$$

Структурная запись уравнение (12) – (16) следующая:

$$\frac{dp}{dt} = P(q, \varphi, \psi, \theta); \quad (17)$$

$$\frac{dq}{dt} = Q(p, \varphi, \psi, \theta); \quad (18)$$

$$\frac{d\theta}{dt} = \Theta(p, q, \varphi); \quad (19)$$

$$\frac{d\psi}{dt} = \Psi(p, q, \varphi, \theta); \quad (20)$$

$$\frac{d\varphi}{dt} = \Phi(p, q, \psi, \theta). \quad (21)$$

Здесь буквами P, Q, Θ, Ψ, Φ обозначены правые части уравнений (12) – (16).

Сначала вычисляем большие величины, выражающие правые части (17) – (21) с индексом один:

$$P_1 = P(q^n, \varphi^n, \psi^n, \theta^n); \quad (22)$$

$$Q_1 = Q(p^n, \varphi^n, \psi^n, \theta^n); \quad (23)$$

$$\Theta_1 = \Theta(p^n, q^n, \varphi^n); \quad (24)$$

$$\Psi_1 = \Psi(p^n, q^n, \varphi^n, \theta^n); \quad (25)$$

$$\Phi_1 = \Phi(p^n, q^n, \varphi^n, \theta^n). \quad (26)$$

Далее эти же величины с индексами два, три и четыре. Разберем это на примере лишь первого уравнения (17):

$$P_2 = P\left(q^n + \frac{h}{2}Q_1, \varphi^n + \frac{h}{2}\Phi_1, \psi^n + \frac{h}{2}\Psi_1, \theta^n + \frac{h}{2}\Theta_1\right); \quad (27)$$

$$P_3 = P\left(q^n + \frac{h}{2}Q_2, \varphi^n + \frac{h}{2}\Phi_2, \psi^n + \frac{h}{2}\Psi_2, \theta^n + \frac{h}{2}\Theta_2\right); \quad (28)$$

$$P_4 = P\left(q^n + hQ_3, \varphi^n + h\Phi_3, \psi^n + h\Psi_3, \theta^n + h\Theta_3\right). \quad (29)$$

Окончательно для нахождения величины проекции угловой скорости на ось Ox на расчетном слое по времени пишем

$$p^{n+1} = p^n + \frac{h}{6}(P_1 + 2P_2 + 2P_3 + P_4). \quad (30)$$

Здесь h – шаг по времени, n , $n+1$ – предыдущий и расчетный слои по времени. Аналогично для q , θ , ψ и φ имеем

$$q^{n+1} = q^n + \frac{h}{6}(Q_1 + 2Q_2 + 2Q_3 + Q_4); \quad (31)$$

$$\theta^{n+1} = \theta^n + \frac{h}{6}(\Theta_1 + 2\Theta_2 + 2\Theta_3 + \Theta_4); \quad (32)$$

$$\psi^{n+1} = \psi^n + \frac{h}{6}(\Psi_1 + 2\Psi_2 + 2\Psi_3 + \Psi_4); \quad (33)$$

$$\varphi^{n+1} = \varphi^n + \frac{h}{6}(\Phi_1 + 2\Phi_2 + 2\Phi_3 + \Phi_4). \quad (34)$$

Проводя последовательные вычисления по указанной выше схеме, найдем решение эволюционной задачи об идеальных колебаниях нанотрубки около центра масс.

Точное аналитическое решение

По соображениям простоты примем, что в начальный момент времени $\varphi(0) = \psi(0) = 0$, $\theta(0) = \theta_0 \neq 0$, кроме того $r_0 = 0$. Тогда в этой позиции плоскость $0z\zeta$ будет совпадать с плоскостью $0\zeta\eta$. Примем также, что вектор магнитной индукции внешнего постоянного магнитного поля направлен по оси 0ζ , то есть $\mathbf{B} = (0, 0, B)$. Так как собственный магнитный момент трубки направлен по оси $0z$, то оба этих вектора будут лежать в указанной выше общей плоскости и все последующее движение будет осуществляться в этой же плоскости. Тогда будем иметь $\varphi = \psi = 0$ во все время движения, а $\theta(t)$ будет искомой функцией.

С учетом этого уравнения (12), (13) запишутся в виде

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\mu}{A} B \sin \theta ; \quad (35)$$

$$\frac{dq}{dt} = 0 . \quad (36)$$

При этом уравнение (15) запишется следующим образом:

$$p = \dot{\theta} . \quad (37)$$

При $p(0) = q(0) = 0$ из уравнения (36) следует, что $q = 0$ во все время движения, то есть поворот вокруг оси Oy будет отсутствовать или, другими словами, движение трубки будет плоским и осуществляться в плоскости $O\xi\eta$.

Подставляя (37) в (35) найдем

$$\ddot{\theta} = -\frac{\mu B}{A} \sin \theta . \quad (38)$$

В уравнении (38) сделаем замену переменных, вводя новую искомую величину

$$Z = \dot{\theta}^2 . \quad (39)$$

Дифференцируя (39) по времени, получим

$$\dot{Z} = 2\dot{\theta}\ddot{\theta} .$$

Отсюда

$$\ddot{\theta} = \frac{1}{2} \frac{\dot{Z}}{\dot{\theta}} = \frac{1}{2} \frac{dZ/dt}{d\theta/dt} = \frac{1}{2} \frac{dZ}{d\theta} .$$

Тогда (38) перепишется следующим образом:

$$\frac{1}{2} \frac{dZ}{d\theta} = -\frac{\mu B}{A} \sin \theta . \quad (40)$$

Умножая (40) на $d\theta$ и интегрируя в пределах от θ_0 до θ , найдем

$$Z - Z_0 = \frac{2\mu B}{A} (\cos \theta - \cos \theta_0) .$$

Так как $p(0) = 0$, то $Z_0 = \dot{\theta}^2(0) = p^2(0) = 0$, поэтому окончательно

$$Z = \frac{2\mu B}{A} (\cos \theta - \cos \theta_0)$$

или

$$\dot{\theta} = \mp \sqrt{\frac{2\mu B}{A} (\cos \theta - \cos \theta_0)} . \quad (41)$$

Это решение использовано для проверки правильности работы численной процедуры. Результаты расчетов показали высокую точность согласования точного и численного решений.

Оценка значений исходных параметров

Первые два из уравнений (4) можно переписать следующим образом:

$$\frac{dp}{dt} = qr_0 + \frac{\mu B_0}{A} [k, \beta]_x , \quad (42)$$

$$\frac{dq}{dt} = -pr_0 + \frac{\mu B_0}{A} [\mathbf{k}, \boldsymbol{\beta}]_y. \quad (42)$$

Здесь B_0 – модуль вектора магнитной индукции внешнего поля, $\mathbf{k}, \boldsymbol{\beta}$ – безразмерные единичные векторы, причем $\mathbf{k}$ направлен по оси трубки, $\boldsymbol{\beta}$ показывает направление внешнего магнитного поля. Коэффициент перед квадратными скобками в правых частях (42), (43) обозначим через E :

$$E = \frac{\mu B_0}{A} (c^{-2}).$$

Оценим численное значение этого коэффициента. В порядке записи величин, в нем содержащихся, стоит величина собственного магнитного момента нанотрубки μ . Принимаем, что эта величина зависит от количества атомов интеркалированного железа. В дальнейшем будем проводить расчеты для $\mu = (1 \div 100) \mu_{\text{Fe}}$, причем известно, что $\mu_{\text{Fe}} = 7 \cdot 10^{-21}$ Дж/Тл.

Масса нанотрубки определяется по формуле

$$m_{\text{нт}} = \frac{4\sqrt{3}}{9} m_C \pi d \cdot l a^{-2}. \quad (44)$$

Здесь $m_C = 1,993 \cdot 10^{-26}$ кг – масса атома углерода, a – расстояние между атомами углерода в кристаллической решетке трубки, d – диаметр трубки, l – ее длина. Далее, по порядку: $d = 20$ нм $= 2 \cdot 10^{-8}$ м; $l = 50$ мкм $= 5 \cdot 10^{-5}$ м; $a = 0,141$ нм $= 1,41 \cdot 10^{-10}$ м.

Таким образом, согласно формуле (44), приближенно получаем

$$m_{\text{нт}} = 2,4 \cdot 10^{-19} \text{ кг.}$$

Магнитная индукция Земли $B_0 = 50$ мкТл $= 5 \cdot 10^{-5}$ Тл. Следовательно, величина параметра E для случая $\mu = \mu_{\text{Fe}}$ будет равна $E = 70 \text{ с}^{-2}$.

Результаты расчетов

На рис. 2 – 5 представлены данные вычислений, отвечающие случаю: $E = 70 \text{ с}^{-2}$, $\theta(0) = 1$, $\psi(0) = -1$, $\varphi(0) = 0$, $p(0) = \pi/2$, $q(0) = 0$, $r(0) = 0$. В этом примере частота собственных колебаний трубки оказалась согласованной с частотой инерционного движения трубки вокруг оси $0x$ (за счет изначально заданного вращения вокруг указанной оси, $p(0) \neq 0$). Как видно из рис. 2, каждый из концов нанотрубки описывает идеальную сферическую ромашку, имеющую тринадцать лепестков. Для всех последующих движений рассматриваемые точки будут в точности повторять контуры лепестков, поскольку реализуемые движения согласованы и осуществляются без учета диссипативных сил (сил трения). Кроме того, из рис. 3 следует, что идеальные колебания с инерционной прецессией индуцируют собственное вращение трубки в направлении, определенном знаком $p(0)$.

На рис. 4, 5 представлен вариант с $E = 7 \cdot 10^3 \text{ с}^{-2}$ и с теми же начальными данными. Как видим, в этом случае частота собственных колебаний увеличилась практически на порядок. При этом амплитуда колебаний остается той же, как и в предыдущем примере, во все время движения, что говорит о выполнении закона сохранения энергии при идеальных колебаниях.

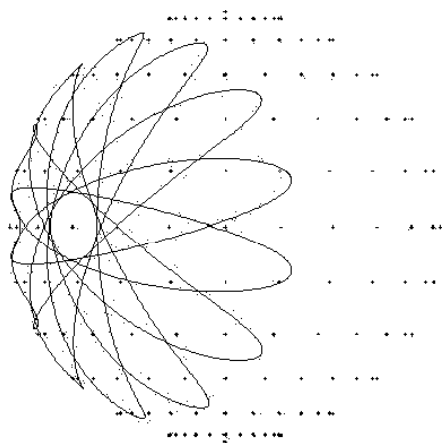


Рис. 2

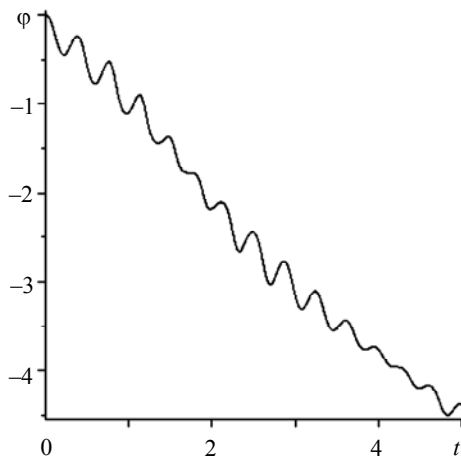


Рис. 3

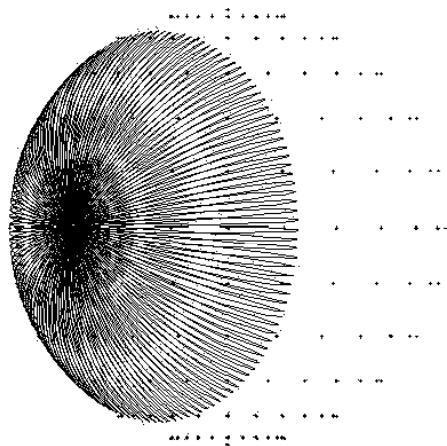


Рис. 4

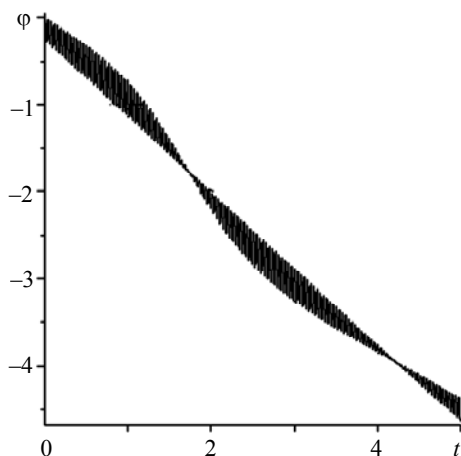


Рис. 5

ЛИТЕРАТУРА

1. Томилов Е.Д. Теоретическая механика: в 2 ч. Томск: Изд-во ТГУ, 1970. Ч. 2. 317 с.
2. Волькенштейн В.С. Сборник задач по общему курсу физики. М.: Наука, 1976. 464 с.
3. Лойцянский Л.Г., Лурье А.И. Курс теоретической механики. М.: Изд-во ТТЛ, 1955. 520 с.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ:

БУБЕНЧИКОВ Михаил Алексеевич – ассистент кафедры теоретической механики Томского государственного университета. E-mail: Michael121@mail.ru

Статья принята в печать 04.05.2010 г.