

Опис переходу між різними режимами руху наночастинок в рамках чотиріпараметричної системи Лоренца

О.В. Ющенко¹, М.А. Руденко

Сумський державний університет, вул. Римського-Корсакова, 2, 40007 Суми, Україна

(Одержано 19.08.2018; у відредагованій формі 05.12.2018; опубліковано online 18.12.2018)

В роботі досліджено рух ансамблю наночастинок довільної форми. Побудовано синергетичну систему чотирьох диференціальних рівнянь, що дозволяє самоузгодженим чином представити перехід між різними режимами руху наночастинок. Отримано ефективну енергію руху ансамблю наночастинок в залежності від швидкості поступального руху. За допомогою методу фазової площини досліджено кінетику системи для різних співвідношень між часами зміни основних параметрів, знайдено умови існування стійких станів. Для стохастичного випадку знайдено, що найбільший вплив мають флуктуації обертового моменту та внутрішньої сили. В рамках методу генеруючого потенціалу було досліджено вплив цих флуктуацій на механізм переходу між режимами руху наночастинок. Дане теоретичне дослідження може бути корисним при прогнозуванні поведінки ансамблю наночастинок довільної форми та при аналізі можливих типів руху за умов зовнішнього впливу.

Ключові слова: Ансамбль наночастинок, Режими руху, Фазовий портрет, Рівняння Ландау-Халатнікова, Рівняння Ланжевена, Стохастичне джерело.

DOI: 10.21272/jnep.10(6).06019

PACS numbers: 61.46. + w, 64.60. – i

1. ВСТУП

Останнім часом увагу вчених все частіше привертають проблеми, пов'язані з описом руху наночастинок [1-9]. Завдяки контрольованому руху наночастинок можна створювати новітні матеріали з певними властивостями та архітектурою, збирати мікро- та нанопристрої (наноротори), можна контролювати різні каталітичні реакції, організовувати доставку ліків в конкретні зони (або клітини) живих організмів і т. ін. [6-11].

Наприклад, науковці Лундського університету Швеції проводили дослідження магнітно скерованих наночастинок з метою змусити клітини пухлин «самознищитися» [12]. Вчені використовували спеціальні намагнічені наночастинки оксиду заліза. Як тільки частинки знаходяться всередині ракових клітин, останні піддаються впливу магнітного поля, а наночастинки починають обертатися і руйнувати клітини. При цьому обертання магнітних наночастинок впливає лише на клітини пухлини. Хоча дане дослідження, в першу чергу, має медичне призначення, але можуть бути й інші сфери застосування.

Не лише експериментальні, а й теоретичні дослідження у цьому напрямку набули актуальності [1, 3, 13]. При цьому більшість робіт пов'язана саме з чисельним моделюванням та комп'ютерними експериментами, що дозволяють точно описати процес при певних початкових, або граничних умовах. Але, на жаль, відсутність аналітичних розв'язань задачі руху наночастинок призводить до відсутності загальної теоретичної схеми, що дозволяє самоузгодженим чином описати рух наночастинок для різних випадків.

У більшості спостережень за наночастинками (як фізичними, так і біологічними) було виявлено, що існують три типи руху:

- направлений, коли частинки рухаються прямолі-

нійно з певною швидкістю;

- обертальний, коли частинки в заданій точці простору здійснюють хаотичні рухи (частіше за все – обертальні);
- змішаний тип руху, коли чергуються або співіснують попередні два типи руху.

Окрім того, дуже важливу роль відіграють колективні ефекти при русі ансамблю наночастинок. Навіть між твердими частинками за рахунок активного обертового руху виникає ефективна взаємодія, що призводить до існування різних станів системи [14-15]. В результаті переходу між режимами руху ансамблю наночастинок можна інтерпретувати за аналогією з фазовими переходами між різними станами конденсованого середовища [2-6]. При цьому врахування колективних ефектів можна відтворити за допомогою синергетичної моделі, що самоузгодженим чином описує систему, що самоорганізується.

Базуючись на більшості експериментальних робіт, де додаткова енергія наночастинкам надавалася в результаті хімічних реакцій [16], впливу вібрації [17] або випромінювання [18], ми зосередились на дослідженні руху частинок, коли перетворений притік енергії приводить до обертового руху, який впливає на поступальну рухливість частинок і спряжений з їх обертальним моментом. В роботі [19] таку взаємодію активних сил з кутовою швидкістю називають активним обертанням. Якщо наночастинки, що обертаються, занурені в рідину, то стає відчутною гідродинамічна взаємодія, яка може бути як притягальною так і відштовхувальною складовою формування вихрових рухів [20]. В роботі [19] було проведено комп'ютерне моделювання такої ефективної взаємодії між частинками, що обертаються в одному та в протилежних напрямках. В результаті була описана спільна динаміка та складна фазова поведінка ансамблю наночастинок.

¹ o.yushchenko@phe.sumdu.edu.ua

В нашій роботі буде запропонована аналітична схема з урахуванням колективних ефектів, стохастичних джерел та активної взаємодії ансамблю наночастинок довільної форми на основі моделі, дослідженої в роботі [19].

2. МОДЕЛЬ ОБЕРТАЛЬНОГО РУХУ

За основу моделі активного руху ансамблю наночастинок в роботі [19] були взяті рівняння Ланжевена для поступального та обертального руху:

$$M\dot{v} + \gamma v = F + \eta(t); \quad (1)$$

$$I\dot{\omega} + \tau\omega = \tau^D + \tau\eta(t); \quad (2)$$

де M , I – маса і момент енергії частинки; v і ω – випадайна (поступального руху) і кутова швидкості відповідно.

Рух кожної частинки задається зовнішнім обертальним моментом $\pm \tau^D$ постійної амплітуди. При цьому знак "+" відповідає обертанню за годинниковою стрілкою; "-" відповідає обертанню проти годинникової стрілки.

Ми будемо мати на увазі тверді частинки, які взаємодіють через чисто відштовхуючий контактний потенціал, який призводить до внутрішніх сил F і обертального моменту τ . Дисипація енергії враховується за допомогою коефіцієнтів опору γ і τ .

Для аналітичного дослідження системи рівнянь (1) - (2) недостатньо, тому в рамках синергетичного підходу з урахуванням ефективної взаємодії та колективних ефектів представимо нову теоретичну схему. За основу візьмемо систему Лоренца, що дозволяє самоорганізується. При цьому параметр порядку, що задає стан системи, в нашому випадку зводиться до поступальної та кутової швидкості руху (v і ω відповідно).

За допомогою цих параметрів можна відрізнити стан системи. Наприклад, три типи руху наночастинок можна розрізнити за значеннями швидкостей:

- тільки поступальний рух $v \neq 0$, $\omega = 0$;
- тільки обертальний $v = 0$, $\omega \neq 0$;
- змішаний тип руху $v \neq 0$, $\omega \neq 0$.

Для того, щоб описати перехід між цими режимами руху з урахуванням вказаних вище ефектів, необхідно доповнити систему (1) - (2) рівняннями для поля, спряженого одному із параметрів порядку, (в нашому випадку це внутрішня сила F) і для керуючого параметра (обертального моменту τ).

$$t_F \partial F / \partial t = -F + a_F \tau v \tau; \quad (3)$$

$$t_\tau \partial \tau / \partial t = \tau^D - \tau - a_\tau v F. \quad (4)$$

Оскільки система (1) - (4) має великий набір констант, що ускладнює аналітичне розв'язання, введемо для часу, поступальної та кутової швидкостей, внутрішньої сили та обертального моменту наступні масштаби:

$$t^{sc} = M/\gamma, \quad v^{sc} = (a_F \tau t_F)^{-1/2},$$

$$\omega^{sc} = (\gamma/I\tau)(a_\tau t_F)^{-1}, \quad F^{sc} = \gamma(a_F \tau t_F)^{-1/2},$$

$$\tau^{sc} = \gamma(a_\tau t_F)^{-1}.$$

Окрім цього скористаємося позначеннями для співвідношень характерних часів релаксації:

$$\sigma \equiv I/(\gamma t^{sc}), \quad \varphi \equiv t_F/t^{sc}, \quad \theta \equiv t_\tau/t^{sc}. \quad (5)$$

В результаті безрозмірна система рівнянь набуває вигляду

$$\partial v / \partial t = -v + F;$$

$$\sigma \partial \omega / \partial t = -\omega + \tau^D + \tau; \quad (6)$$

$$\varphi \partial F / \partial t = -F + v \tau;$$

$$\theta \partial \tau / \partial t = \tau^D - \tau - v F.$$

3. ПЕРЕХІД МІЖ РЕЖИМАМИ РУХУ НАНОЧАСТИНОК ЗА МЕХАНІЗМОМ ДРУГОГО РОДУ

Але, навіть позбавившись від великої кількості констант, знайти точний розв'язок системи (6) неможливо, тому необхідно розглянути найбільш придатне наближення.

Для реальних фізичних систем дуже часто характерна ситуація, коли час життя амплітуди гідродинамічної моди (параметра порядку) є найбільшим. Для системи (6) це відповідає випадку, коли найбільшим буде масштаб часу t^{sc} , тобто

$$\sigma, \varphi, \theta \ll 1. \quad (7)$$

Провівши розрахунки, маємо залежності обертального моменту, внутрішньої сили, та обертальної швидкості

$$\tau = \tau^D / (1 + v^2); \quad (8)$$

$$F = (v \tau^D) / (1 + v^2); \quad (9)$$

$$\omega = \tau^D (2 + v^2) / (1 + v^2). \quad (10)$$

від швидкості поступального руху.

Після врахування вказаних залежностей замість системи (6) отримуємо одне диференційне рівняння:

$$\partial v / \partial t = -v + (v \tau^D) / (1 + v^2),$$

що має вигляд рівняння Ландау-Халатнікова:

$$\partial v / \partial t = -\partial E / \partial v, \quad (11)$$

де ефективна енергія руху E визначається співвідношенням:

$$E = v^2 / 2 - (\tau^D / 2) \ln(1 + v^2). \quad (12)$$

Мінімуми енергії відповідають стійким станам системи, що за попередньою класифікацією описують або тільки обертальний, або змішаний рух.

Таким чином існує два стаціонарних стани системи:

- $v_0 = 0$ (при $\tau^D \leq 1$), $\omega = 2\tau^D$ – обертальний рух (непорядкований стан)
- $v_0 = \pm(\tau^D - 1)^{1/2}$ (при $\tau^D > 1$), $\omega = 1 + \tau^D$ – змішаний рух (упорядкований стан).

Але окрім дослідження стаціонарних параметрів актуальним постає аналіз динамічних режимів переходу між цими станами. Тому, беручи за основу систему (6), дослідимо кінетику системи на базі ана-

логічних часових наблизень.

Найбільш зручним методом для аналізу системи двох диференціальних рівнянь першого порядку є метод фазової площини, що дозволяє знайти не лише стійкі стани системи, а й описати її кінетику. Тому для спрощення системи (6) розглянемо випадок, коли

$$t_{sc} \gg t_F, t_i, t^{sc} \sim (I/\gamma_r).$$

Тоді замість (6) маємо:

$$\partial v/\partial t = -v + F; \tag{13}$$

$$\sigma \partial \omega/\partial t = -\omega + \tau^D + \tau, \tag{14}$$

де τ та F визначаються співвідношеннями (8), (9).

Знайдемо особливі точки в фазовому просторі $v - \omega$. Для цього вирішимо систему рівнянь:

$$0 = -v + (v\tau^D)/(1 + v^2);$$

$$0 = -\omega + \tau^D(2 + v^2)/(1 + v^2).$$

Для даної системи існують 3 особливі точки з координатами $O(0; 2\tau^D)$, $A((\tau^D - 1)^{1/2}; 1 + \tau^D)$ та $B(-(\tau^D - 1)^{1/2}; 1 + \tau^D)$. Відповідні фазові портрети зображені на Рис. 1. При цьому невпорядкований стан системи характеризує точка O (показники Ляпунова якої $\lambda_1 = \tau^D - 1$, $\lambda_2 = -1/\sigma$), що відповідає стійкому вузлу при $\tau^D < 1$ (див. Рис. 1а) та сідлу при $\tau^D > 1$ (див. Рис. 1б). Впорядкований стан системи характеризують точки A та B (показники Ляпунова $\lambda_1 = 2(\tau^D - 1)/\tau^D$, $\lambda_2 = -1/\sigma$), що існують лише за умови $\tau^D > 1$ і відповідають стійкому вузлу (див. Рис. 1б).

Далі розглянемо випадок, коли

$$t_s \gg t_i, (I/\gamma_r).$$

Тоді замість (6) маємо систему рівнянь:

$$\partial v/\partial t = -v + F; \tag{15}$$

$$\varphi \partial F/\partial t = -F + v\tau; \tag{16}$$

Знайдемо особливі точки в фазовому просторі $v - F$, вирішивши систему рівнянь:

$$0 = -v + F;$$

$$0 = -F + v(\tau^D - vF);$$

Аналогічно попередньому випадку маємо три особливі точки з координатами $O(0; 2\tau^D)$, $A((\tau^D - 1)^{1/2}; (\tau^D - 1)^{1/2})$, та $B(-(\tau^D - 1)^{1/2}; -(\tau^D - 1)^{1/2})$. На відміну від попереднього випадку перехід до впорядкованого стану (змішаного типу руху наночастинок) може реалізуватися за коливальним механізмом.

Існування коливального режиму (існування фокусу в точках A, B) можливе за умови, коли обертальний момент τ^D , що задається зовнішніми умовами, належить діапазону:

$$\tau^D \in \left(3\varphi - \sqrt{8\varphi(\varphi - 1)}; 3\delta + \sqrt{8\varphi(\varphi - 1)} \right).$$

Відповідні фазові портрети наведено на Рис. 2.

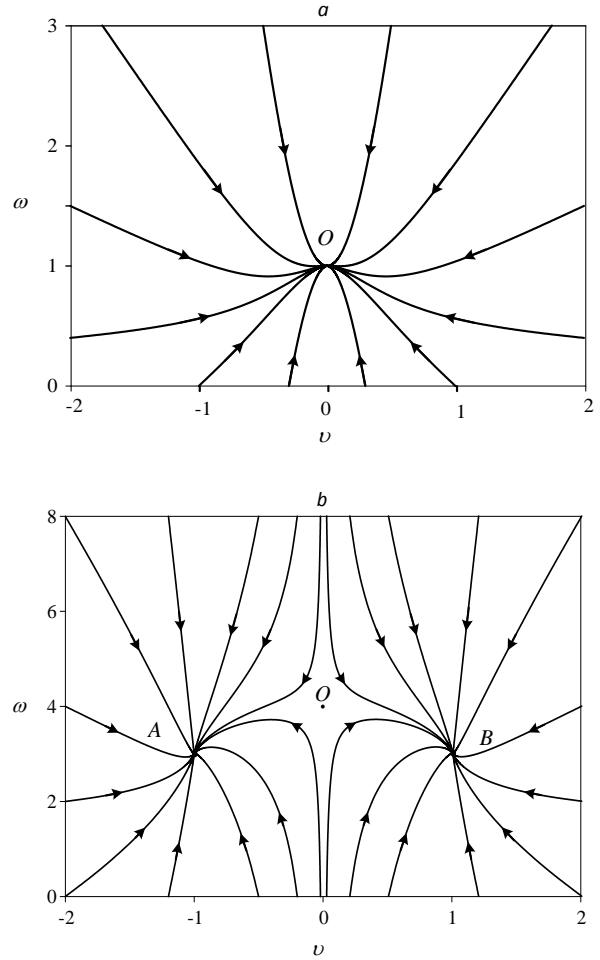


Рис. 1 – Фазові портрети системи (13) – (14) при $\sigma = 1$ та значенні зовнішнього обертального моменту $\tau^D = 0,5$ (а) і $\tau^D = 2$ (б)

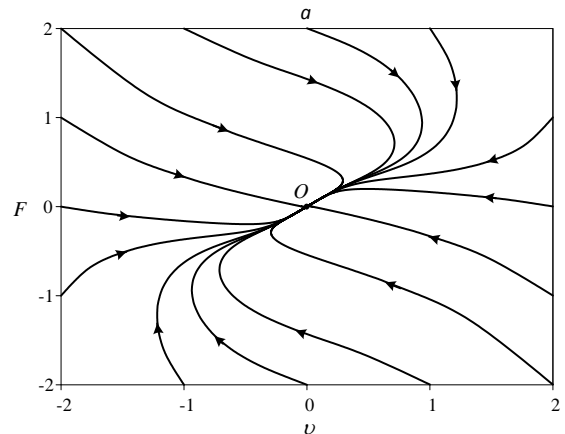
Нарешті розглянемо випадок, коли

$$t_s \gg t_F, (I/\gamma_r).$$

Тоді замість (6) маємо:

$$\partial v/\partial t = -v + F; \tag{17}$$

$$\theta \partial u/\partial t = \tau^D - \tau - vF. \tag{18}$$



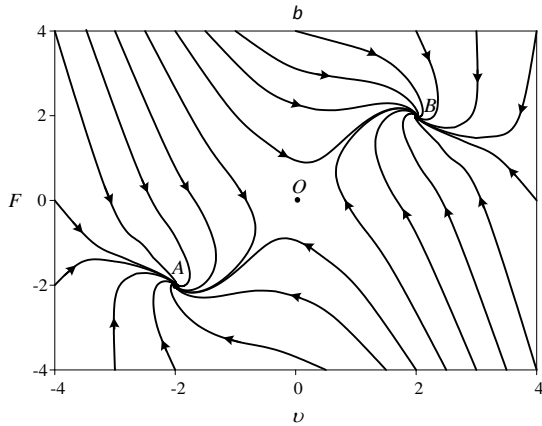


Рис. 2 – Фазові портрети системи (15) - (16) при $\varphi = 2$ та значенні зовнішнього обертального моменту $\tau^D = 0,5$ (a) і $\tau^D = 5$ (b)

Знайдемо особливі точки системи (17) - (18) в фазовому просторі $v - \tau$, вирішивши систему:

$$\begin{aligned} 0 &= -v + v\tau; \\ 0 &= \tau^D - \tau(1 + v^2). \end{aligned}$$

Умова існування фокусів в даному випадку задається нерівністю:

$$\tau^{D2} < 8\theta(\tau^D - 1).$$

Таким чином до коливального режиму в точках A, B приводить τ^D з даного діапазону:

$$\tau^D \in \left(4\theta - \sqrt{8\theta(2\theta - 1)}; 4\theta + \sqrt{8\theta(2\theta - 1)} \right).$$

Відповідні фазові портрети системи наведені на Рис. 3.

Таким чином, проаналізувавши фазові портрети для різних типів наближень, слід відмітити, що існує два стійкі стани системи, один з яких відповідає чисто обертальному руху (точка O на фазових портретах), інший – змішаному (точки A та B, що відрізняються лише протилежним напрямком швидкості поступального руху). При цьому основною умовою, за якої стійким стає обертальний рух є зовнішній обертальний момент $\tau^D < 1$. За протилежної умови стійким стає змішаний тип руху, тобто окрім обертального ансамблю наночастинок здійснює і поступальний рух зі сталою швидкістю. За різних умов (за

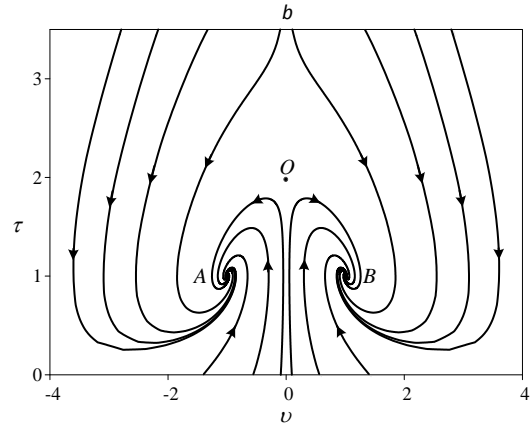
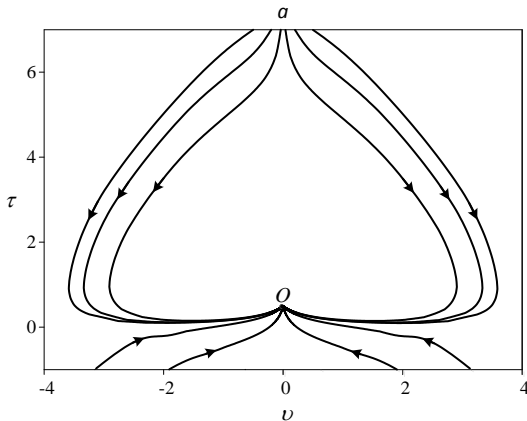


Рис. 3 – Фазові портрети системи (17) - (18) при $\theta = 2$ та значенні зовнішнього обертального моменту $\tau^D = 0,5$ (a) і $\tau^D = 2$ (b)

певних співвідношень між параметрами системи) перехід між цими двома станами може мати коливальний характер.

4. ПЕРЕХІД МІЖ РЕЖИМАМИ РУХУ НАНОЧАСТИНОК ЗА МЕХАНІЗМОМ ПЕРШОГО РОДУ

Перехід між різними режимами руху може реалізуватися і у випадку стрибкоподібної зміни швидкості. Але у межах попереднього аналізу стаціонарне значення швидкості змінюється поступово (див. Рис. 1b). Для дослідження іншого механізму переходу скористаємося найпростішою апроксимацією для коефіцієнту опору γ :

$$\gamma(v) = \gamma(1 + z/(1 + (v/v_c)^2)).$$

Тоді загальна система рівнянь набирає вигляду:

$$\begin{aligned} M \partial v / \partial t &= -\gamma(1 + z/(1 + (v/v_c)^2))v + F; \\ I \partial \omega / \partial t &= -\gamma\omega + \tau^D + \tau; \\ \partial F / \partial t &= -F/t_F + a_F v \tau; \\ \partial \tau / \partial t &= (\tau^D - \tau)/t_\tau - a_\tau v F. \end{aligned}$$

В результаті аналогічного безрозмірювання системи та введення позначення для співвідношень характерних швидкостей:

$$(v^{sc}/v_c)^2 \equiv \alpha,$$

основна система рівнянь набуває вигляду:

$$\begin{aligned} \partial v / \partial t &= -(1 + z/(1 + v^2 \alpha))v + F; \\ \sigma \partial \omega / \partial t &= -\omega + \tau^D + \tau; \\ \varphi \partial F / \partial t &= -F + v \tau; \\ \theta \partial \tau / \partial t &= \tau^D - \tau - v F. \end{aligned} \tag{19}$$

Розглянемо випадок, коли найбільшим буде масштаб часу t^{sc} , тобто

$$t^{sc} \gg t_F, t_\tau, (I/\gamma).$$

Тоді лівими частинами трьох останніх рівнянь системи (19) можна знехтувати

$$\begin{aligned}\partial v/\partial t &= -(1+z/(1+v^2\alpha))v + F; \\ 0 &= -\omega + \tau^D + \tau; \\ 0 &= -F + v\tau; \\ 0 &= \tau^D - \tau - vF.\end{aligned}$$

При цьому вирази для внутрішньої сили, обертого моменту та обертової швидкості будуть такими самими, як і для випадку фазового переходу другого роду. Після врахування вказаних залежностей (8) - (10) замість системи (19) отримуємо одне диференціальне рівняння:

$$\partial v/\partial t = -v(1+z/(1+v^2\alpha)) + (v\tau^D)/(1+v^2),$$

що має вигляд рівняння Ландау-Халатнікова (11), де ефективна енергія E визначається співвідношенням (див. Рис. 4):

$$E = v^2/2 + (z/2\alpha)\ln(1+v^2\alpha) - (\tau^D/2)\ln(1+v^2). \quad (20)$$

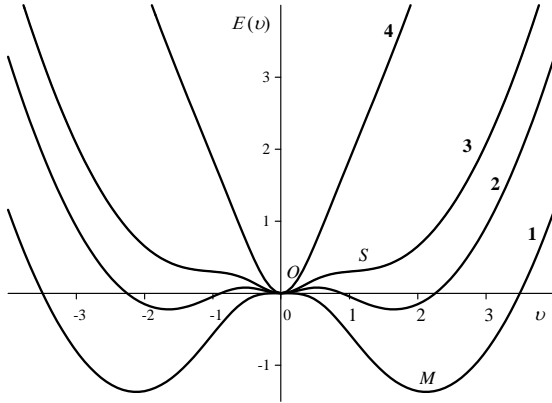


Рис. 4 – Залежність енергії руху частинок від швидкості їх поступального руху, коли зовнішній обертольний момент $\tau^D = 11$ (крива 1); $\tau^D = 9,5$ (крива 2); $\tau^D = 8,5$ (крива 3); $\tau^D = 4$ (крива 4); та параметри $z = 10$; $\alpha = 2$

На рисунку 4 наведена ефективна енергія руху ансамблю наночастинок в залежності від швидкості їх поступального руху. При цьому мінімуми енергії відповідають стійким станам системи, що описують або тільки обертольний (точка O на Рис. 4), або змішаний рух (точка M на Рис. 4). Невпорядкований стан системи або обертольний рух відповідає $v = 0$; впорядкований стан або змішаний рух зі сталою поступальною швидкістю $-v = v_0 \neq 0$. На відміну від попередніх випадків перехід між станами системи відбувається за механізмом фазового переходу першого роду (стрибокподібно). При збільшенні значення зовнішнього обертольного моменту τ^D спочатку з'являється точка перегину S (крива 3), яка потім перетворюється на максимум та мінімум (крива 2). В результаті можливе співіснування декількох режимів руху, про що свідчить наявність максимуму, який розділяє два мінімуми, на залежності ефективної енергії (крива 2 на рис.4).

Знайдемо екстремуми синергетичного потенціалу (20):

- неупорядкований стан $v_0 = 0$;
- впорядкований стан:

$$v_{01} = \pm \sqrt{\frac{-m + \sqrt{m^2 - 4\alpha n}}{2\alpha}}; \quad v_{02} = \pm \sqrt{\frac{-m - \sqrt{m^2 - 4\alpha n}}{2\alpha}};$$

де $m = 1 + \alpha + z - \tau^D\alpha$, $n = 1 + z - \tau^D$.

При цьому на залежності стаціонарного значення швидкості поступального руху від значення зовнішнього обертольного моменту зростання швидкості за рахунок зменшення моменту є нефізичним, тоді як інша частина відображає саме стрибкоподібну зміну швидкості поступального руху під час переходу між різними режимами руху наночастинок.

5. СТОХАСТИЧНА МОДЕЛЬ ОБЕРТАЛЬНОГО РУХУ НАНОЧАСТИНОК

5.1 Стохастична система рівнянь з урахуванням білого шуму

Самоузгоджена поведінка системи з додаванням стохастичних джерел $\eta(t)$ представляє собою узгоджені рівняння Лоренца:

$$\begin{aligned}M\dot{\gamma} \partial v/\partial t &= -v + F\dot{\gamma} + \eta(t)\sqrt{I_v}; \\ I\dot{\gamma} \partial \omega/\partial t &= -\omega + (\tau^D + \tau)\dot{\gamma} + \eta(t)\sqrt{I_\omega}; \\ t_F \partial F/\partial t &= -F + \alpha t_F v\tau + \eta(t)\sqrt{I_F}; \\ t_\tau \partial \tau/\partial t &= \tau^D - \tau - \alpha t_\tau vF + \eta(t)\sqrt{I_\tau}.\end{aligned} \quad (21)$$

Тут білий шум задається кореляторами

$$\langle \eta(t) \rangle = 0, \quad \langle \eta(t) \eta(t') \rangle = \delta(t - t'),$$

а інтенсивності флуктуацій надалі будемо визначати масштабами:

$$\begin{aligned}I_v^{sc} &= (\alpha t_F t_\tau)^{-1}, \\ I_\omega^{sc} &= (\gamma/\dot{\gamma})^2 (\alpha t_F)^{-2}, \\ I_F^{sc} &= \gamma^2 (\alpha t_F t_\tau)^{-1}, \\ I_\tau^{sc} &= \gamma^2 (\alpha t_F)^{-2}.\end{aligned}$$

В результаті безрозмірна система рівнянь набуває вигляду:

$$\begin{aligned}\partial v/\partial t &= -v + F + \eta(t)\sqrt{I_v}; \\ \sigma \partial \omega/\partial t &= -\omega + \tau^D + \tau + \eta(t)\sqrt{I_\omega}; \\ \varphi \partial F/\partial t &= -F + v\tau + \eta(t)\sqrt{I_F}; \\ \theta \partial \tau/\partial t &= \tau^D - \tau - vF + \eta(t)\sqrt{I_\tau}.\end{aligned} \quad (22)$$

Після аналізу системи в рамках умови (7) маємо залежності для обертольного моменту, внутрішньої сили та обертової швидкості відповідно:

$$\begin{aligned}\tau &= \tau^D/(1+v^2) + \eta(t)(\sqrt{I_\tau} - v\sqrt{I_F})/(1+v^2); \\ F &= (v\tau^D)/(1+v^2) + \eta(t)(v\sqrt{I_\tau} + \sqrt{I_F})/(1+v^2); \\ \omega &= \tau^D(2+v^2)/(1+v^2) + \eta(t)((\sqrt{I_\tau} - v\sqrt{I_F}) +\end{aligned}$$

$$+ (1 + v^2) \sqrt{I_\omega} / (1 + v^2).$$

Перше рівняння системи (22) при цьому набуває вигляду рівняння Ланжевена:

$$\partial v / \partial t = f(v) + \eta(t) \sqrt{I(v)}; \quad (23)$$

де ефективна сила задається виразом

$$f(v) = - \partial E / \partial v = v (\tau^D - v^2 \tau - 1),$$

а ефективна інтенсивність шуму

$$I(v) = \sqrt{I_v} + \sqrt{I_\tau} v + \sqrt{I_F} (v^2 + 1).$$

Судячи з рівнянні Ланжевена (23), складова, що описує інтенсивність шуму, взагалі не містить доданку, який задається обертальною швидкістю. А доданок з інтенсивністю шуму швидкості поступального руху значного впливу не вносить, тому надалі має сенс розглядати вплив тільки стохастичних джерел для внутрішньої сили та обертального моменту.

5.2 Стохастична система рівнянь з урахуванням шуму у вигляді Орнштейна-Уленбека

Розглянемо систему рівнянь з урахуванням шумів внутрішньої сили, та обертального моменту

$$\begin{aligned} \partial v / \partial t &= -v + F; \\ \sigma \partial \omega / \partial t &= -\omega + \tau^D + \tau; \\ \delta \partial F / \partial t &= -F + v\tau + \zeta(t); \\ \gamma \partial \tau / \partial t &= \tau^D - \tau - vF + \xi(t). \end{aligned} \quad (24)$$

Але оскільки вплив білого шуму на фазові переходи в складних системах достатньо добре вивчений, розглянемо стохастичні джерела, що представляють собою процес Орнштейна-Уленбека:

$$\begin{aligned} \langle \zeta(t) \rangle &= 0, \quad \langle \zeta(t) \zeta(t') \rangle = (I_F / \lambda_F) \exp(-|t - t'| / \lambda_F); \\ \langle \xi(t) \rangle &= 0, \quad \langle \xi(t) \xi(t') \rangle = (I_\tau / \lambda_\tau) \exp(-|t - t'| / \lambda_\tau), \end{aligned}$$

де I_F, I_τ – інтенсивності флуктуацій спряженого поля (внутрішня сила F) та керуючого параметру (обертального моменту τ), та λ_F, λ_τ – часи їх кореляцій.

Аналітично система (24) не може бути розв'язана, тому для розрахунків використаємо два наближення:

$$\lambda_F \approx \lambda_\tau = \lambda; \quad I_F = k^2 I_\tau.$$

Перше наближення задає однаковий масштаб зміни у часі стохастичних доданків для сили та обертального моменту; друге – лінійний зв'язок між їх інтенсивностями.

Тоді інтенсивність шуму обертального моменту I_τ можна виразити через I_F

$$\langle \zeta(t) \zeta(t') \rangle = (k^2 I_F / \lambda) \exp(-|t - t'| / \lambda) = k^2 \langle \xi(t) \xi(t') \rangle.$$

Проводячи обезрозмірювання аналогічно попереднім випадкам, отримуємо систему рівнянь, що описує флуктуаційний перехід у безрозмірному вигляді:

$$\partial v / \partial t = -v + F; \quad (25)$$

$$\sigma \partial \omega / \partial t = -\omega + \tau^D + \tau; \quad (26)$$

$$\delta \partial F / \partial t = -F + v\tau + k\xi(t); \quad (27)$$

$$\gamma \partial \tau / \partial t = \tau^D - \tau - vF + \xi(t). \quad (28)$$

Тут враховано співвідношення характерних часів релаксації (5).

Зазвичай швидкості поступального та обертального рухів зменшуються набагато повільніше ніж обертальний момент, тому можна скористатися співвідношеннями

$$I \gamma_\tau \ll t^{sc}; \quad t_\tau \ll t^{sc},$$

в рамках яких система рівнянь (25) - (28) зводиться до одного рівняння для параметру порядку $v(t)$.

Аналізуючи систему (25) - (28) з першого рівняння знайдемо внутрішню силу:

$$F = \partial v / \partial t + v, \quad (29)$$

а останнє рівняння при цьому набуває вигляду:

$$\tau = \tau^D - v(\partial v / \partial t + v) + \xi(t). \quad (30)$$

Підставляючи отримані рівності (29), (30) до рівняння (27), отримуємо

$$\delta \partial F / \partial t = (1/\delta) [-\partial v / \partial t - v + v\{\tau^D - v(\partial v / \partial t + v) + \xi(t)\} + k\xi(t)]. \quad (31)$$

Продиференціювавши рівняння (25) і підставивши до нього вираз (31), приходимо до еволюційного рівняння, що має канонічну форму нелінійного стохастичного осцилятора Ван дер Поля:

$$\partial^2 v / \partial t^2 + \gamma(v)(\partial v / \partial t) = f(v) + g(v)\xi(t), \quad (32)$$

де ефективні коефіцієнт тертя, сила та амплітуда шуму задаються рівняннями:

$$\gamma(v) = 1 + (1 + v^2) / \delta;$$

$$f(v) = [\tau^D - (1 + v^2) / \delta] v;$$

$$g(v) = (v + k) / \delta.$$

Знайдемо функцію розподілу системи в фазовому просторі, утворену швидкістю v і прискоренням $\partial v / \partial t$ залежно від часу t . Для цього ми представляємо рівняння Ейлера (32) в рамках формалізму Гамільтона:

$$\partial v / \partial t = a, \quad (33)$$

$$\partial a / \partial t = -\gamma(v)a + f(v) + g(v)\xi(t). \quad (34)$$

В результаті необхідна густина імовірності $P(v, a, t)$ зводиться до функції розподілу $\rho(v, a, t)$ рішенням системи (33) - (34):

$$P(v, a, t) = \langle \rho(v, a, t) \rangle_\xi.$$

Оскільки ми розглядаємо довготривалу і згладжену поведінку відповідно до [21], то (32) можна представити як

$$\partial^2 v_i / \partial t^2 + \gamma(v_i)(\partial v_i / \partial t) = f(v_i) + g(v_i)\xi_i(t).$$

для набору змінних v_1, v_2, \dots, v_n та $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n$ (використовуючи підсумовування за повторними індексами).

Після множення рівняння Крамера на a^n , після інтегрування за прискоренням a можна отримати

рекурентне співвідношення (див. [21] та посилання в ній), яке представляє собою ієрархічну систему рівнянь:

$$\begin{aligned} (\partial P/\partial t) &= -(\partial P_1/\partial t), \\ \gamma(v)P_1 &= f(v)P(v) - (\partial P_2/\partial v) - \\ &- M_1[g(\partial g(v)/\partial v)(v) + g^2(v)(\partial P(v)/\partial v)], \quad (35) \\ \gamma(v)P_2 &= g^2(M_0 - M_1 \gamma(v))P(v). \end{aligned}$$

Вирази для нульового та першого моментів:

$$M_0 = I_r; \quad M_1 = I_r \lambda.$$

Розв'язуючи циклічну систему рівнянь (35) ми приходимо до рівняння Фоккера-Планка

$$(\partial P(v)/\partial t) = -(\partial(D_1(v)P(v))/\partial v) + (\partial^2(D_2(v)P(v))/\partial v^2), \quad (36)$$

де дрейфовий коефіцієнт

$$D_1(v) = (1/\gamma(v))[f(v) - M_0(g^2(v)/\gamma^2(v))(\partial\gamma(v)/\partial v) + M_1 g(v)(\partial g(v)/\partial v)],$$

і дифузійний коефіцієнт

$$D_2(v) = M_0(g^2(v)/\gamma^2(v)).$$

Провівши розрахунки, отримуємо:

$$D_1(v) = (1/(\delta + 1 + v^2))\{\tau^D - (1 + v^2)\}v - (2I_r v(v + k)^2)/(\delta + 1 + v^2)^2 + (I_r \lambda(v + k)/\delta),$$

$$D_2(v) = I_r(v + k)^2/(\delta + 1 + v^2)^2.$$

Рівняння (36) може бути представлено як рівняння безперервності розподілу ймовірності $P(v, t)$:

$$(\partial P(v)/\partial t) + (\partial S(v)/\partial v) = 0,$$

де $S(v, t)$ трактується як потік імовірності:

$$S(v) = D_1(v)P(v) - (\partial D_2(v)P(v)/\partial v). \quad (37)$$

У стаціонарному випадку розподіл імовірності $P(v, t)$ не залежить від часу, а потік імовірності (37) приймає постійне значення ($S = const$). У результаті розподіл обчислюється за формулою:

$$P(v) = (1/D_2(v)) \exp\left[\int_0^v (D_1(v')/D_2(v')) \partial v'\right] \times [Z - S(v) \int_0^v \exp(-\int_0^{v''} (D_1(v'')/D_2(v'')) \partial v'') \partial v''].$$

де N – константа нормування:

$$Z = \left(\int_0^{+\infty} (dv/D_2(v)) \exp\left[\int_0^v (D_1(v')/D_2(v')) \partial v'\right] \partial v'\right)^{-1} \times \{1 + S(v) \int_0^{+\infty} [\exp(\int_0^{v''} (D_1(v'')/D_2(v'')) \partial v'') \times \int_0^{v''} \exp(-\int_0^{v'''} (D_1(v''')/D_2(v''')) \partial v''') \partial v'''] (dv/D_2(v))\}.$$

Якщо вибрати константу S за початок відліку потоку імовірності ($S = 0$), то отримуємо:

$$P(v) = (Z^{-1}/D_2(v)) \exp\left[\int_0^v (D_1(v')/D_2(v')) \partial v'\right]. \quad (38)$$

При

$$Z = \int_{-\infty}^{+\infty} (dv/D_2(v)) \exp\left[\int_0^v (D_1(v')/D_2(v')) \partial v'\right].$$

При цьому умова екстремуму розподілу (38) зводиться до виразу:

$$D_1(v) - \partial D_2(v)/\partial v = 0.$$

Провівши обчислення, отримуємо рівняння, що визначає стаціонарну швидкість поступального руху наночастинок:

$$\tau^D = 1 + v^2 - (I_r \lambda(v + k))/\delta v + [(v(v + k)/(\delta + 1 + v^2)) - 1] \times (2I_r(v + k)^2)/v(\delta + 1 + v^2)^2,$$

яка наведена на рисунку 5.

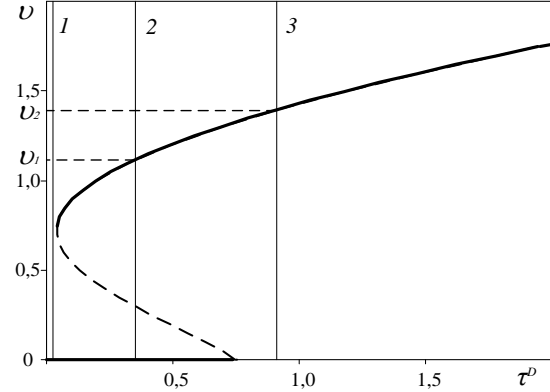


Рис. 5 – Стаціонарна залежність швидкості поступального руху наночастинок від зовнішнього обертового моменту при $\delta = 1$, $\lambda = 1$, $k = 0,5$, та $I_r = 1,8$

При цьому значення $v = 0$ можливе тільки при значенні $\lambda = 2\delta/(\delta + 1)$.

Як видно з рисунку 5 для різних значень зовнішнього обертового моменту можливе існування декількох режимів:

- промінь 1 відповідає режиму існування тільки обертового руху (єдине стаціонарне значення швидкості $v = 0$);
- промінь 2 – змішаний тип руху, коли реалізуються дві стаціонарні швидкості: $v = 0$, $v = v_1$;
- промінь 3 – прямолінійний рух зі стаціонарною швидкістю v_2 .

При інших значеннях шумів були отримані залежності, де можливі швидкості руху в зворотному напрямку.

Умови екстремумів при цьому задаються рівняннями:

$$\begin{aligned} \partial \tau^D/\partial v &= 2v + (I_r \lambda k/\delta v^2) - [4I_r(v + k)/(\delta + 1 + v^2)^2] \times \\ &\times [1 - 2v(v + k)/(\delta + 1 + v^2)] - (2I_r/v^2(\delta + 1 + v^2)) \times \\ &\times (2v^3 + \delta k + k + 3kv^2) = 0; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \partial^2 \tau^D/\partial v^2 &= 2 - (2I_r \lambda k/\delta v^3) - [4I_r/(\delta + 1 + v^2)^2] \times \\ &\times [1 - 4v(v + k)/(\delta + 1 + v^2)] + (8I_r/(\delta + 1 + v^2)^3) \times \\ &\times [3v^2 + 4vk + k^2 - 6v(v^3 + 2kv^2 + vk^2)/(\delta + 1 + v^2)] - \\ &- 4I_r[3(v + k)/v(\delta + 1 + v^2) - \\ &- (\delta + 1 + 2v^2)(2v^3 + \delta k + k + 3kv^2)/v^3(\delta + 1 + v^2)^2] = 0, \end{aligned}$$

при числовому розв'язанні яких може бути побудована фазова діаграма існування різних режимів руху системи.

6. ВИСНОВКИ

В результаті дослідження руху ансамблю наночастинок довільної форми була побудована синергетична система чотирьох диференціальних рівнянь, що дозволяє самоузгодженим чином представити перехід між режимами руху частинок – обертовим,

прямолінійним та змішаним. В якості параметрів порядку, що відрізняють стани системи, було використано швидкість поступального руху частинок та кутову швидкість обертання; роль поля, спряженого параметру порядку, відіграла внутрішня сила, а в якості керуючого параметра використовувався обертальний момент.

В рамках адиабатичного наближення вказана система рівнянь зводилася до рівняння Ландау-Халатнікова, вирішуючи яке було отримано ефективну енергію руху ансамблю наночастинок в залежності від швидкості їх поступального руху.

За допомогою методу фазової площини було досліджено кінетику системи, застосовуючи різні співвідношення для часів релаксації головних параметрів системи. Були знайдені умови існування стійких станів та проаналізовано типи переходів між ними.

З урахуванням стохастичних джерел для всіх чо-

тирх параметрів в рамках адиабатичного наближення було знайдено, що найбільший вплив мають флуктуації керуючого параметра та спряженого поля.

В рамках методу генеруючого потенціалу було досліджено вплив флуктуацій керуючого параметра та спряженого поля у вигляді процесу Орнштейна-Уленбека. В результаті знайдено стаціонарну залежність швидкості руху наночастинок в залежності від зовнішнього обертального моменту та проаналізовано можливі типи рухів.

На відміну від комп'ютерного моделювання в роботі [19] дане теоретичне дослідження може бути корисним при прогнозуванні поведінки ансамблю наночастинок довільної форми та при аналізі можливих типів руху за умов зовнішнього впливу.

Робота виконана в рамках держбюджетної теми № 0118U003584 (2018-2020 pp.).

Description of the Transition Between Different Modes of Nanoparticle's Motion Within the Four-parameter Lorentz System

O.V. Yushchenko, M.A. Rudenko

Sumy State University, 2, Rimsky Korsakov Str., 40007 Sumy, Ukraine

In this work, the motion of a arbitrary form nanoparticle ensemble has been studied. A synergistic system of four differential equations is constructed, which allows a self-consistent way to represent a transition between different modes of motion of nanoparticles. The effective energy of motion of an ensemble of nanoparticles is obtained, depending on the velocity of the translational motion. Using the method of the phase plane, the kinetics of the system for different ratios between the times of the change of the basic parameters is investigated, the conditions for the existence of stable states are found. For a stochastic case, it has been found that the fluctuations of the torque and internal forces have the greatest influence. In the framework of the method of generating potential, the effect of these fluctuations on the mechanism of transition between modes of nanoparticle movement was investigated. This theoretical study may be useful in predicting the behavior of an ensemble of nanoparticles of arbitrary shape and in analyzing possible types of motion under conditions of external influence.

Keywords: Nanoparticles ensemble, Modes of motion, Phase portrait, Landau-Halatsnikov equation, Langevin equation, Stochastic sources.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. A. Sokolov, I.S. Aranson, J.O. Kessler, R.E. Goldstein, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 158102 (2007).
2. O.V. Yushchenko, T.I. Zhylenko, *Condens. Matter. Phys.* **16**, 13605 (2013).
3. P. Romanczuk, I.D. Couzin, L. Schimansky-Geier, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 010602 (2009).
4. H. Chaté, F. Ginelli, G. Grégoire, F. Raynaud, *Phys. Rev. E* **77**, 046113 (2008).
5. L.S. Metlov, M.M. Myshlyayev, A.V. Khomenko, I.A. Lyashenko, *Tech. Phys. Lett.* **38**, 972 (2012).
6. A. Kudrolli, G. Lumay, D. Volfson, L.S. Tsimring, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 058001 (2008).
7. H.H. Wensink, H. Löwen, *Phys. Rev. E* **78**, 031409 (2008).
8. N.V. Prodanov, A.V. Khomenko, *Surf. Sci.* **604**, 730 (2010).
9. F. Peruani, A. Deutsch, M. Bär, *Eur. Phys. J-Spec. Top.* **157**, 111 (2008).
10. O.I. Olemskoi, O.V. Yushchenko, T.I. Zhylenko, *Ukr. J. Phys.* **56**, 474 (2011).
11. A. Baskaran, M.C. Marchetti, *Phys. Rev. E* **77**, 011920 (2008).
12. E. Zhang, M.F. Kircher, M. Koch, *ACS Nano*, **8**, 3192 (2014).
13. O.V. Yushchenko, T.I. Zhylenko, M.A. Rudenko, *NAP 2017*, 01NNPT10 (2017).
14. G.S. Redner, M.F. Hagan, A. Baskaran, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 055701 (2013).
15. J. Bialké, T. Speck, H. Löwen, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 168301 (2012).
16. I. Theurkauff, C. Cottin-Bizonne, J. Palacci, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 268303 (2012).
17. K. Roeller, J.P. Clewett, R.M. Bowley, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 048002 (2011).
18. J. Palacci, S. Sacanna, A.P. Steinberg, *Science* **339**, 936 (2013).
19. F. Ginelli, F. Peruani, M. Bär, H. Chaté, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 184502 (2010).
20. B.A. Grzybowski, G.M. Whitesides, *Science* **296**, 718 (2002).
21. A. Khomenko, D. Kharchenko, O. Yushchenko, *Вісник Львівського університету*, **37**, 44 (2004).