

01

Солитон в стенке нанотрубки и стоксово течение в ней

© И.Ю. Попов, О.А. Родыгина, С.А. Чивилихин, В.В. Гусаров

Санкт-Петербургский государственный университет информационных технологий, механики и оптики

Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет)

E-mail: popov@mail.ifmo.ru

В окончательной редакции 12 мая 2010 г.

Предложена явно решаемая модель течения в нанотрубке, вызванного упругим солитоном в ее стенке. Математическая основа модели — теория самосопреженных расширений симметрических операторов.

Состояние и свойства вещества в наноканалах, в том числе связанные с его массопереносом, очень специфичны, что определяется влиянием пространственных ограничений в виде стенок наноканалов. Указанное влияние может зависеть как от их формы и размеров пространственных ограничений, так и от химического состава, строения, морфологии стенок. Экспериментально и теоретически было показано, что при уменьшении размеров наноканалов до определенных значений вещество, находящееся в нем, изменяет свое строение по сравнению с таковым в макроразмерном состоянии [1–3]. Возможно, изменение и состава вещества вследствие перераспределения компонентов между веществом в наноканале и сосуществующей с ним объемной фазой [4,5]. Как следствие указанных изменений, меняется поведение вещества в наноканалах. Кроме того, в процессе перемещения вещества в наноканале также возможно изменение его строения, в частности вследствие образования динамических, например, вихреобразных структур [6,7]. Изменение состояния вещества в наноканале по сравнению с его макросостоянием определяет характер и скорость его перемещения в канале, что может оказаться полезным для практического применения [4].

Таким образом, эффекты, рассмотренные в вышеуказанных работах, определяются составом, строением и механическим поведением стенок наноканалов. В связи с этим актуальным является изучение взаимного

влияния массопереноса в наноканале и механического поведения его стенок. Течения в нанотрубках очень специфичны и сильно отличаются от классических. Теория таких течений еще не разработана. Имеется ряд моделей, объясняющих некоторые свойства нанотечений [8]. В случае узких нанотрубок с упругими стенками (например, углеродных) наблюдаются упругие волны в стенках трубки [9], это может оказывать сильное влияние на характер течения в ней. В настоящей работе предлагается явно решаемая модель такого течения. Показано, что распространяющийся в стенке трубки солитон порождает течение в трубке.

Стенки нанотрубки можно рассматривать как систему периодических цепочек молекул (атомов). Солитоны в длинных молекулярных цепях (в частности, спиральных, геометрически похожих на нанотрубки) активно изучались [10]. Существуют разные модели таких цепочек [11,12]. Мы в данной работе рассмотрим модель, которую обычно называют „давыдовским“ солитоном. Чтобы описать такой солитон, можно рассмотреть экситон эффективной массы m , взаимодействующий со смещением $u(x, t)$ молекул масс M от равновесных положений в точках $x = na$. Гамильтониан имеет вид [10]

$$H = \frac{1}{a} \int \left(\frac{\hbar^2}{2m} |\psi_x|^2 + \frac{1}{2} M u_t^2 + M V_0^2 U(\rho) - \vartheta \rho |\psi|^2 \right) dx, \quad (1)$$

где ρ — относительное уменьшение равновесного расстояния a между соседними молекулами, $\rho = -u_x$, V_0 — продольная скорость звука в линейной аппроксимации цепочки, ϑ — энергия, которая характеризует взаимодействие экситона со смещением, $U(\rho)$ — безразмерный потенциал межмолекулярного взаимодействия, имеющий минимум при $\rho = 0$, ψ — нормированная экситонная волновая функция. Учитывая вид гамильтониана, получаем систему:

$$\begin{aligned} i\hbar\psi_t + \frac{\hbar^2}{2m} \psi_{xx} + \vartheta\rho\psi &= 0, \\ u_{tt} - V_0^2 U_{\rho\rho} u_{xx} &= \frac{\vartheta}{M} (|\psi|^2)_x. \end{aligned} \quad (2)$$

Система имеет устойчивое решение типа солитона с профилем (т.е. амплитудой волновой функции ψ) Φ , зависящим от U . В частности, для

кубической нелинейности $U(\rho) = \frac{1}{2}\rho^2 + \frac{\nu}{3}\rho^3$:

$$\Phi(\xi) = \frac{1}{2} \left(\frac{3\sigma}{4} \right)^{1/3} \left(\frac{\tau}{\gamma} \right)^{1/3} \operatorname{sch}^2 \left(\frac{1}{2} \left(\frac{\tau\sigma^2}{6\gamma} \right)^{1/3} \xi \right). \quad (3)$$

Скорость V этого солитона такова:

$$V = V_0 \frac{\gamma m + \tau M (1 - 3(\gamma\sigma)^{1/3} (\tau/6)^{2/3} / 5)}{\gamma m + \tau M}, \quad \sigma = \frac{2\vartheta m a^2}{\hbar^2}, \quad \tau = \frac{\vartheta}{M V_0^2}. \quad (4)$$

Следует заметить, что солитон устойчив, если $V < V_0$. Геометрически этот солитон выглядит как локальное расширение или сужение трубки (определяемое функцией Φ), движущееся со скоростью V . Это движение вызывает движение жидкости в окрестности солитона.

Для описания данного течения мы предлагаем модель, в которой локальное возмущение границы заменяется точечным. Стоксовы течения с точечными возмущениями (стокслетами, ротлетами и т.п.) рассматриваются во многих работах [12,13]. Математическую основу такой модели дает теория самосопряженных расширений симметрических операторов [14]. Рассмотрим осесимметричное стоксово течение в цилиндре (оценки числа Рейнольдса [3] показывают, что для течения в нанотрубке приемлема стоксова модель). Оно описывается с помощью функции тока Ψ , удовлетворяющей уравнению

$$\Delta^2 \Psi = \left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) \right)^2 \Psi = 0.$$

Что касается граничного условия, более удобно рассматривать движущуюся границу и покоящуюся сингулярность (эта задача эквивалентна исходной, благодаря линейности уравнений Стокса). В этом случае граничное значение нормальной производной функции тока ненулевое (оно равно скорости стенки).

Опишем кратко модель точечного возмущения для двумерного течения Стокса. Построение начинается с оператора Δ_0^2 , который является замыканием сужения Δ^2 на множество гладких функций, образующихся в нуль в заданной точке. Область определения данного оператора такова:

$$D(\Delta_0^2) = \{u, u \in L_2(\Omega), \Delta^2 u \in L_2(\Omega), \\ u(0) = u'_{x_i}(0) = u''_{x_i x_j}(0) = 0, \quad i, j = 1, 2\}.$$

Модельный оператор Δ_e^2 строится как самосопряженное расширение симметрического оператора Δ_0^2 . Из-за соотношения $\Delta_0^2 \subset \Delta_e^2 \subset \Delta_0^{2*}$ можно искать нужное расширение среди сужений сопряженного оператора Δ_0^2 , область определения которого состоит из функций вида

$$u(x) = \sum_{i,j=1}^2 c_{ij}^u g_{x_i x_j}(x) + \sum_{i=1}^2 c_i^u g_{x_i}(x) + c_0 g(x) + \xi(x)(a_0 + \sum_{i=1}^2 a_i^u x_i + \sum_{i,j=1}^2 a_{ij}^u \beta_{ij} x_i x_j) + u_0(x). \quad (5)$$

Здесь $u_0 \in D(\Delta_0)$, $\beta_{ij} = 1$, $i \neq j$, $B_{ii} = 2^{-1}$, $\xi(x)$ — гладкая срезающая функция: $\xi(x) = 1$, $|x| \leq 1$, $\xi(x) = 0$, $|x| \geq 2$. Модельный оператор (расширение) выделяется заданием некоторой связи между коэффициентами в асимптотиках, например:

$$U_0 = AU_1, U_1 = (c_0^u, c_1^u, c_2^u, c_{11}^u, c_{12}^u, c_{22}^u), \\ U_0 = (a_0^u, a_1^u, a_2^u, a_{11}^u, a_{12}^u, a_{22}^u), A = A^*.$$

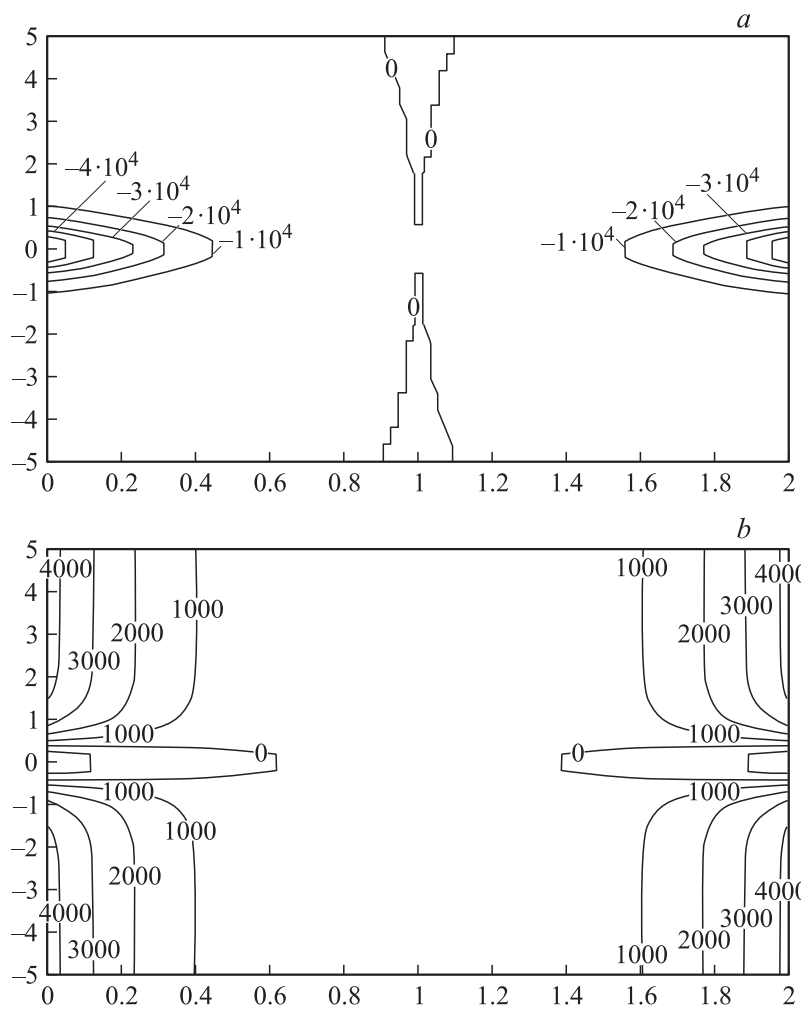
Описание всех возможных расширений см. в [15,16].

Функция тока для данного модельного оператора и дает искомую модель течения. Пусть радиус цилиндра равен 1, а роглет находится в точке $(1, 0)$ (напомним, что мы рассматриваем движущуюся стенку и покоящийся роглет). Тогда решение имеет вид

$$\Psi(r, z) = r^2 \frac{c}{2} + \operatorname{Re} \left[\sum_m a (-J_1(\mu_m) J_0(\mu_m r) + r J_1(\mu_m r) J_0(\mu_m)) \exp(\mu_m |z|) \right. \\ \left. + \int_{-\infty}^{\infty} \sum_m b (-J_1(\mu_m) J_0(\mu_m r) + r J_1(\mu_m r) J_0(\mu_m)) \right. \\ \left. \times \exp(-\mu_m |z - \eta|) d\eta \left(v - \frac{c}{2} \right) \right]. \quad (6)$$

Здесь a , b — некоторые константы, v — скорость роглета (в нашем случае — скорость стенки), c — поток через поперечное сечение трубки, μ_n — n -й корень уравнения

$$J_0(\mu)(J_1(\mu) + \mu J_1'(\mu)) - J_1(\mu) \mu J_0'(\mu) = 0. \quad (7)$$



Картина линий тока при следующих значениях параметров: ячеистая структура течения — $a = 10^6$, $b = 10^{-6}$, $c = 10^{-4}$, $v = 10^4$; (отсутствие ячеистой структуры течения — $a = 10^5$, $b = 10^1$, $c = 10^4$, $v = 10^{-2}$).

Картина течения показана на рисунке. Ее характер зависит от соотношения параметров. В частности, при $a = 10^6$, $b = 10^{-6}$, $c = 10^{-4}$, $v = 10^4$ течение оказывается разделенным на три области (ячейки) (см. рисунок, *a*), а при $a = 10^5$, $b = 10^1$, $c = 10^4$, $v = 10^{-2}$ такое разделение отсутствует, и имеется только вихрь в окрестности ротлета (см. рисунок, *b*). В этих режимах увлекаемое солитоном количество жидкости значительно различается. При построении модели локальное возмущение границы заменялось на точечное, что позволило добиться явной решаемости. Однако появились модельные параметры, которые необходимо выбирать, проводя сравнение характеристик (в частности, завихренности) реального возмущения (с границей, определяемой профилем солитона Φ) и модельного.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, программы президиума РАН „Основы фундаментальных исследований нанотехнологий и наноматериалов“, программы „Развитие потенциала высшей школы России“ (проект 2.1.1/4215) и программы „Научные и научно-педагогические кадры инновационной России 2009–2013 гг.“.

Список литературы

- [1] Чернышева М.В., Киселева Е.А., Елисеев А.А., Лукашин А.В., Третьяков Ю.Д., Киселев Н.А., Жигалина О.М., Крестинин А.В., Хатчисон Д.Л. // Альтер. энер. и экол. 2008. № 1. С. 22–29.
- [2] Альмяшева О.В., Альмяшев В.И., Ершова А.А., Кириллова С.А., Красилин А.А., Попов И.Ю., Свитенков А.И., Чивилихин С.А., Гусаров В.В. // Труды НИЦ фотоники и оптоинформатики. 2009. В. 1. С. 109–124.
- [3] Чивилихин С.А., Попов И.Ю., Гусаров В.В. // Докл. РАН. 2007. Т. 412. № 2. С. 201–203.
- [4] Кононова С.В., Корыткова Э.Н., Ромашкова К.А., Кузнецов Ю.П., Гофман И.В., Светличный В.М., Гусаров В.В. // ЖПХ. 2007. Т. 80. № 12. С. 2064–2070.
- [5] Альмяшева О.В., Гусаров В.В. // Докл. РАН. 2009. Т. 424. № 5. С. 641–644.
- [6] Гусаров В.В., Попов И.Ю. // Изв. вузов. Физика. 1995. Т. 38. № 8. С. 69–75.
- [7] Gusarov V.V., Popov I.Yu. // Nuovo Cimento. 1996. V. 18D. N 7. P. 799–805.
- [8] Маслов В.П. // ТМФ. 2007. Т. 153. N 3. С. 1677–1796.
- [9] Inseperov Z., Wolf D., Hassanein A. // Nano Letters. 2006. V. 6. N 9. P. 1893–1895.

- [10] Давыдов А.С. Солитоны в молекулярных системах. Киев: Наук. думка, 1988. 303 с.
- [11] Brizhik L., Eremko A., Piette B., Zakrzewski W. // Int. J. Quant. Chem. 2010. V. 110. P. 10–24.
- [12] Хуснутдинова К.Р., Самсонов А.М., Захаров А.С. // ТМФ. 2009. Т. 159. № 3. С. 475–489.
- [13] Попов I.Yu. // Physica Scripta. 1993. V. 47. P. 682–686.
- [14] Gugel Yu.V., Popov I.Yu., Popova S.L. // Fluid Dyn. Res. 1996. V. 18 (40). P. 199–210.
- [15] Павлов Б.С. // УМН. 1987. Т. 42. № 6. С. 99–131.
- [16] Попов I.Yu. // Rev. Mat. Univ. Compl. Madrid. 1996. V. 9. N 1. P. 235–258.