

**НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ  
ІНСТИТУТ МОНОКРИСТАЛІВ**

Масловський Юрій Миколайович

УДК 530.182, 531.3

**ФІЗИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ СТРУКТУРНО-СКЛАДНИХ ЧАСТИНОК**

01.04.02 – теоретична фізика

**АВТОРЕФЕРАТ**  
дисертації на здобуття наукового ступеня  
кандидата фізико-математичних наук

Харків – 2015

**Дисертацією є рукопис**

Робота виконана в Інституті монокристалів НАН України.

Науковий керівник: доктор фізико-математичних наук, професор  
**Яновський Володимир Володимирович,**  
завідувач відділу теорії конденсованого стану  
речовини Інституту монокристалів НАН України

Офіційні опоненти: доктор фізико-математичних наук, старший  
науковий співробітник  
**Болотін Юрій Львович,**  
завідувач відділу теоретико-групових властивостей  
елементарних частинок, теорії ядра та нелінійної  
механіки Інституту теоретичної  
фізики ННЦ ХФТІ НАН України

доктор фізико-математичних наук, професор  
**Ходусов Валерій Дмитрович,**  
завідувач кафедри теоретичної ядерної фізики та вищої  
математики імені О.І. Ахієзера  
Харківського національного університету ім.  
В.Н.Каразіна МОН України

**Захист відбудеться «13» січня 2016р. о 14 годині на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 64.169.01 Інституту монокристалів НАН України (61001, м. Харків, пр. Леніна, 60)**

З дисертацією можна ознайомитись у науковій бібліотеці Інституту монокристалів НАН України за адресою: 61001, м. Харків, пр. Леніна, 60.

Автореферат розісланий «\_\_» грудня 2015р.

Вчений секретар  
спеціалізованої вченої ради  
кандидат фізико-математичних наук

М.В. Добротворська

## ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

**Актуальність теми.** Розглядаючи макроскопічну частинку або тіло, досить часто використовується уявлення про неї як про точкову частинку. Таке уявлення здається досить надійним, якщо вивчати її властивості на масштабах, що значно перевищують її розміри. Проте, в деяких випадках викликають інтерес властивості частинок, що залежать від її внутрішнього устрою та розмірів. Такі частинки вже не можна розглядати як точкові, і вплив їх устрою, тобто внутрішніх ступенів свободи, може призводити до незвичайного поведіння. Особливу інтерес представляє частинка з невеликим числом внутрішніх ступенів свободи, коли її властивості залежать від їхнього числа. Окрім цього, зараз інтенсивно розвивається вивчення властивостей різноманітних наносистем. Цікаво відзначити, що модель структурно-складної частинки має експериментальну реалізацію у вигляді нанотрубки з фулереном всередині. З цієї точки зору також цікаво вивчити загальні властивості деяких «складних частинок», що мають невелику кількість внутрішніх ступенів свободи. Важливі властивості, на яких проявляється зміна числа внутрішніх ступенів свободи, включають навіть такі прості і фундаментальні характеристики як режими вільного руху та характер взаємодії таких частинок з іншими об'єктами. Це означає необхідність вивчення кінематики і динаміки таких частинок.

Ще більш цікаві властивості можуть виникати при зіткненні таких об'єктів одне з одним. Перехід до більш реалістичних моделей передбачає збільшення розмірності таких об'єктів до тривимірних. Моделі, що відповідають частинкам з внутрішніми ступенями свободи, при наявності заряджених ступенів свободи мають стосунок і до цікавих плазмових проблем. Такі частинки можуть як моделювати згустки частинок, так і призводити до аномальних режимів випромінювання хвиль під впливом зовнішніх полів. Оскільки задача про рух зарядженої структурно-складної частинки з двома внутрішніми ступенями свободи виявляється еквівалентною руху зарядженої частинки в трикутному більярді в певному постійному ефективному електричному полі, вивчення режимів руху більярдної частинки в трикутному більярді в зовнішньому полі представляє інтерес для багатьох проблем. Крім цього, такий більярд має і самостійний інтерес для руху частинок в порожнинах під впливом постійного поля. У таких випадках спостерігаються незвичайні властивості балістичної провідності.

**Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами.** Дисертаційна робота виконувалась у відповідності з планом науково-дослідних робіт Інституту монокристалів НАН України, а саме тем відомчого замовлення:

-«Дослідження класичних та квантових властивостей складних нелінійних систем з розгалуженням» (шифр «Когерентність» № держреєстрації 0107U000855) – 2007-2009р.р.

-«Визначення квантових, термодинамічних та транспортних властивостей систем малих розмірів» (шифр «Нанотех» № держреєстрації 0110U002401) - 2010-2012р.р.

-«Визначення фундаментальних закономірностей зовнішніх впливів на наносистеми з невеликою кількістю внутрішніх ступенів свободи» (шифр «Нанотип» № держреєстрації 0113U003228) - 2013-2015р.р.,

а також відповідно до індивідуального плану аспіранта.

**Мета і завдання дослідження.** Мета дослідження полягає у виявленні кінематичних і динамічних властивостей структурно-складної частинки з невеликою кількістю внутрішніх ступенів свободи, визначення можливих режимів руху в постійних полях.

Для досягнення поставленої мети необхідно було вирішити наступні завдання:

– вивчити закономірності зіткнень структурно-складної частинки з внутрішніми ступенями свободи з бар'єром;

– знайти режими поведінки зарядженої структурно-складної частинки в електричному полі;

– встановити властивості випромінювання зарядженої структурно-складної частинки в постійному електричному полі;

– вивчити режими руху тривимірних структурно-складних частинок.

**Об'єктом дослідження** є поведінка структурно-складних частинок з невеликим числом внутрішніх ступенів свободи.

**Предмет дослідження** — кінематичні і динамічні властивості структурно-складних частинок з невеликим числом внутрішніх ступенів свободи.

**Методи дослідження** - теорія динамічних систем, методи ергодичної теорії бильярдів, теорії детермінованого хаосу, якісний аналіз динамічної поведінки у фазовому просторі, методи статистичної фізики, чисельний аналіз та комп'ютерне моделювання.

**Наукова новизна одержаних результатів.** У дисертаційній роботі отримані наступні нові результати:

1. Запропоновано одновимірну модель структурно-складної частинки з внутрішніми ступенями свободи. Розвинуто бильярдний підхід для дослідження властивостей таких структурно-складних частинок. Виявлено можливі кінематичні режими руху таких частинок і їх властивості. У разі двох внутрішніх ступенів свободи встановлено всі можливі режими рухів таких частинок.

2. Побудовано теорію відбиття частинок з внутрішніми ступенями свободи від бар'єра. Виявлено ефект багаторазових зіткнень такої частинки з бар'єром до її відбиття. Отримано закони відбиття частинок з внутрішніми ступенями свободи, які відрізняються від законів відбиття безструктурних частинок. Встановлено можливі режими відбиття частинок з внутрішніми ступенями свободи від бар'єра. Доведено існування аномальних режимів відбиття від бар'єра структурно-складних частинок, в яких швидкість частинки після відбиття перевищує її швидкість до зіткнення з бар'єром.

3. Узагальнено бильярдний підхід до опису динамічних режимів руху частинок з внутрішніми ступенями свободи в постійних зовнішніх полях. Отримано аналітично

динамічне відбиття руху структурно-складної частинки з двома внутрішніми ступенями свободи в постійному полі. Встановлено нові режими руху таких частинок з невеликим числом внутрішніх ступенів свободи в постійному електричному полі та критерії їх реалізації. Показано виникнення двох типів хаотичних режимів: сильний хаос та перемежаємість.

4. Встановлено властивості випромінювання структурно-складної частинки з одним зарядженим внутрішнім ступенем свободи. Отримано спектр випромінювання і доведено, що потужність випромінювання перевищує на порядки потужність випромінювання еквівалентної безструктурної частинки. З'ясовано вплив тертя в середовищі на спектр випромінювання.

5. Запропоновано тривимірну модель структурно-складної частинки з внутрішніми ступенями свободи та відповідний більярдний формалізм. З'ясовано властивості ефективного багатовимірного більярда. Аналітично досліджено режими руху з одним внутрішнім ступенем свободи. Доведено, що для частинок з великим числом внутрішніх ступенів свободи типовими є хаотичні режими руху. Виявлений режим незвичайного хаотичного блукання структурно-складної частинки. Встановлено закон розподілу енергії за внутрішніми ступенями свободи.

**Практичне значення отриманих результатів.** Одержані результати розширюють фундаментальні уявлення про кінематичні і динамічні властивості частинок з малим числом внутрішніх ступенів свободи. У роботі виявлені не тільки кількісні, а й якісні ефекти, які з'являються у частинок з малим числом внутрішніх ступенів свободи. Так, аномальний режим зі збільшенням швидкості руху частинки після відбиття повинен спостерігатися у малих кластерах різних речовин. Це означає зміну характеру взаємодії таких кластерів при зіткненнях і поява нових ефектів пов'язаних з утворенням кластерних структур.

Сучасні експериментальні методи дозволяють створювати нанорозмірні структури, що мають структурно-складний устрій, розпочато роботи з проектування і створення нанопристроїв і нанороботів. Властивості всіх таких об'єктів належать до класу об'єктів, вивчених у дисертаційній роботі. Основні закономірності, виявлені в рухах структурно-складних частинок, є необхідними і важливими для реалізації управління, оптимізації систем з невеликим числом внутрішніх ступенів свободи. Тому одержані в дисертаційній роботі результати можуть бути використані при розробці сучасних нанорозмірних механізмів і пристроїв. Виявлена ефективність генерації електромагнітних хвиль структурно-складними частинками також може знайти застосування при створенні нанорозмірних випромінювальних пристроїв.

**Особистий внесок здобувача.** Усі основні результати, винесені на захист, отримані дисертантом особисто. У роботах, опублікованих у співавторстві [1-5], дисертанту належать основні розрахунки, побудова графічних залежностей, він брав активну участь у постановці завдань, обговоренні отриманих результатів і написанні текстів статей.

Так в роботі [1] ним виявлено ефект багаторазових зіткнень такої частинки з

бар'єром до її відбиття. Отримано закони відбиття частинок з внутрішніми ступенями свободи, які відрізняються від законів відбиття безструктурних частинок. У роботах [2, 4] здобувачем узагальнено більярдний формалізм на випадок заряджених частинок, побудовані біфуркаційні діаграми можливих перебудов режимів руху. Отримано точне динамічне відбиття, яке описує динаміку структурно-складної частинки в природньому фазовому просторі. Встановлено нові режими руху таких частинок з невеликим числом внутрішніх ступенів свободи в постійному електричному полі. Встановлені фізичні властивості руху композитної частинки з двома внутрішніми ступенями свободи в постійному полі. У роботі [3] встановлені властивості випромінювання структурно-складної частинки з одним зарядженим внутрішнім ступенем свободи. Отримано спектр випромінювання і доведено, що потужність випромінювання перевищує на порядки потужність випромінювання еквівалентної безструктурної частинки. У роботі [5] узагальнена модель структурно-складної частинки з внутрішніми ступенями свободи і відповідний більярдний формалізм. Аналітично досліджено режими руху з одним внутрішнім ступенем свободи. Встановлено, що для частинок з великим числом внутрішніх ступенів свободи типовими є хаотичні режими руху. Встановлено закон розподілу енергії за внутрішніми ступенями свободи.

**Апробація результатів дисертації.** Матеріали дисертації доповідалися і обговорювалися на наукових семінарах Інституту монокристалів НАНУ, а також на наступних вітчизняних та міжнародних конференціях:

- VII Международная школа-семинар молодых ученых “Рост кристаллов”, Харьков, 2013,
- V Young Scientists Conference, Problems of Theoretical Physics, Kyiv, 2013,
- Ukrainian-German Symposium of Physics and Chemistry of Nanostructures and Nanobiotechnology, Kyiv, 2015,
- 4<sup>th</sup> International Scientific and Technical Conference for Young Scientists “Luminescent processes in condensed state of matter”, Kharkov, 2015,
- International Meeting on Clusters and Nanostructured Materials (CNM-4), Uzhgorod, 2015.

**Публікації.** За темою дисертації опубліковано 10 робіт, у тому числі 5 статей у фахових виданнях та 5 тез доповідей міжнародних наукових конференцій.

**Структура роботи.** Дисертаційна робота складається з вступу, п'яти розділів, висновків, двох додатків та списку літератури зі 137 джерел. Робота містить 58 малюнків, повний обсяг зі 132 сторінок, з яких 119 основного тексту.

## ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** обґрунтовується вибір і актуальність теми дисертації, формулюються об'єкт і мета дослідження, методи та теоретичні засади вирішення поставлених завдань. Розкривається питання наукової новизни і практичної цінності отриманих

результатів.

**Перший розділ** присвячено огляду літератури за темою дисертаційної роботи. У цьому розділі обговорюються системи та об'єкти, які можливо розглядати як структурно-складні системи з невеликою кількістю внутрішніх ступенів свободи. Виявлено багато прикладів таких фізичних систем. Обговорені труднощі, які виникають з пошуком підходів до дослідження таких систем. Приділено значну увагу причинам, через які звичайний термодинамічний формалізм до таких систем не можливо застосовувати, або потрібно його радикально модифікувати. Значну увагу приділено прикладам аномальних залежностей у ряді звичайних фізичних систем, які виникають з причини збільшення ролі поверхні малих частинок. До таких треба віднести, наприклад, добре відому залежність температури плавлення від розміру частинки. Іншим прикладом порушення класичних уявлень може слугувати навіть лапласівський тиск малих наночастинок. Серед причин через які тиск Лапласа може виявитися неадекватним присутня навіть така загальна причина, як виконання умов термодинамічної рівноваги з навколишнім середовищем, та якою мірою взагалі вони виконуються для реальних нанорозмірних тіл. Загалом, нетривіальним є навіть питання про можливість застосування термодинаміки до таких малих систем з невеликою кількістю внутрішніх ступенів свободи через зростання ролі флуктуацій і відсутності термодинамічної межі. Невелике число ступенів свободи в таких системах вимагає побудови специфічних підходів, у яких не виконується термодинамічна межа.

До систем з невеликою кількістю внутрішніх ступенів свободи потрібно віднести і системи з динамічною провідністю, коли їх провідність визначається балістичними режимами рухів електронів. Особливу увагу викликає провідність наносистем складної форми. Виникає незвичайна ситуація, коли характер провідності визначається формою меж провідної нано-структури. Виявлені аномалії вдалося пояснити використовуючи класичні закони руху електронів у відкритих біліардах. Було доведено, що хаотичні режими визначають транспортні характеристики електронів в наноструктурах. Останнє відіграє важливу роль у розвитку сучасної нанорозмірної електроніки. Такі дослідження демонструють ефективність використання біліардного підходу до цього класу проблем. Тому, використанню концепції біліардів у фізичних проблемах приділено значну увагу у першому розділі. Зокрема, обговорюються поширення цієї концепції на велику кількість фізичних більш складних систем. Наприклад, обговорюється важливий тип узагальнень біліардів, який пов'язаний з композитними більярдами. Важливий новий елемент, що виникає в цих більярдах, проявляється не тільки у відбитті від межі розділу середовищ, але і в проходженні променів через межі між двома середовищами. Іншими словами, з'являється природний механізм розмноження променів при падінні на межі розділу середовищ. Таким чином, у першому розділі виявлено підґрунтя до поширення концепції біліардів на системи з невеликою кількістю внутрішніх ступенів свободи. Актуальність такого поширення пов'язана як з великим інтересом до таких систем, так і з можливістю використання значних наукових досягнень для виявлення незвичайних

властивостей структурно-складних систем без використання термодинамічного формалізму.

У другому розділі було запропоновано просту модель одновимірної складної частинки, що має внутрішні ступені свободи. Де оболонка частинки - це циліндр довжиною  $L$  з бортами та масою  $M$ . Всередині оболонки вільно рухається внутрішня частинка маси  $m$  (рис. 1).

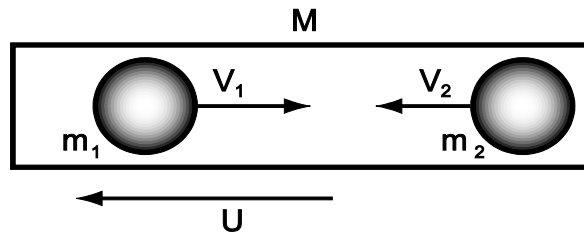


Рис.1. Одновимірна модель складної частинки з внутрішніми ступенями свободи.

Специфіка цієї моделі полягає в тому, що при зіткненні внутрішньої частинки з оболонкою вона змінює свій імпульс у відповідності з законом збереження сумарного імпульсу системи частинка-оболонка. Зіткнення оболонки з внутрішньою частинкою вважається абсолютно пружними, як і зіткнення внутрішніх частинок між собою. Збільшуючи кількість внутрішніх частинок можна збільшувати кількість внутрішніх ступенів свободи такої частинки. Важливо підкреслити, що введені таким чином ступені свободи взаємодіють одна з одною та з оболонкою частинки. Зі збільшенням кількості внутрішніх ступенів свободи слід очікувати переходу до макроскопічної частинки та обґрунтуванню гіпотези Ньютонів про закономірності зіткнень таких макроскопічних тіл.

Для дослідження такої структурно-складної частинки з внутрішніми ступенями свободи у другому розділі запропоновано специфічний біліардний формалізм, що розповсюджується і на випадок зіткнень їх з бар'єром та між собою. У цьому формалізмі кінематична поведінка такої складної частинки з внутрішніми ступенями свободи однозначно відтворюється рухом одної точкової частинки у багатовимірному призматичному біліарді. Розмірність конфігураційного простору або біліарду обумовлено кількістю внутрішніх ступенів свободи. У найпростішому випадку з одним внутрішнім ступенем свободи ефективний біліард зводиться до більярду в смузі, що дозволило легко отримати повну інформацію про всі кінематичні режими такої частинки. Розгляд структурно-складної частинки з двома внутрішніми ступенями свободи веде до біліарду у вигляді трикутної призми у трьохвимірному просторі. Поведінка частинки у такому біліарді повністю розглянута, що дозволило також виявити можливі кінематичні режими рухів структурно-складної частинки з двома внутрішніми ступенями свободи. Якісні зміни кінематичних режимів руху залежать від співвідношення відносних мас внутрішніх ступенів свободи. В залежності від цього можливі слабо хаотичні режими, та періодичні режими. Умови реалізації таких режимів і діаграма періодичних режимів (рис. 2) наведені у цьому розділі.

В третій частині другого розділу розглянуто взаємодію структурно-складної



частинки з єдиним внутрішнім ступенем свободи з твердою стінкою або з бар'єром. Взаємодія оболонки з бар'єром мається на увазі абсолютно пружною. Біліардний формалізм легко поширюється і на випадок абсолютно пружного відбиття від бар'єру структурно-складної частинки і з більшою кількістю внутрішніх ступенів свободи. Зміна форми ефективного біліарду відповідає фізичній умові неможливості проникнення оболонки за бар'єр, що відповідає відповідному обмеженню біліарда новою границею. У випадку одного ступеня свободи відповідний біліард наведено на рис. 3.

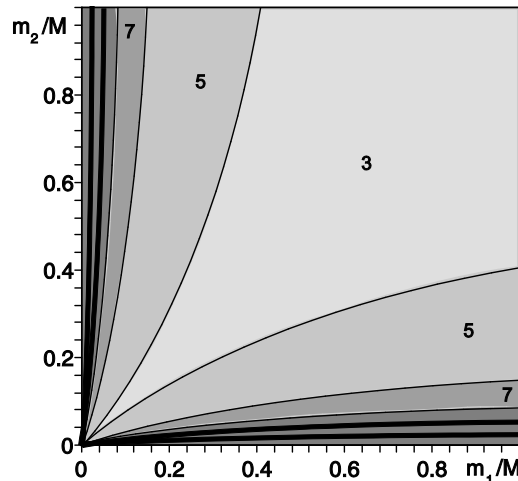


Рис.2. Области різних періодичних режимів у просторі відносних мас. В області 3 реалізується режим періоду 3. В області 5 можливі 3-періодичні режими і 5-періодичні. В області 7 можливі 7,5 і 3-періодичні режими. Аналогічно влаштовані і більш вузькі зони з ще вищими періодичними режимами 9, 11,...

Поведінку точкової частинки у такому відкритому біліарді було повністю вивчено аналітично. В підсумку отримано досить незвичайні ефекти відбиття від бар'єру структурно-складних частинок з внутрішніми ступенями свободи.

Перш за все було доведено, що за відповідних умов оболонка до відбиття стикається з бар'єром багато разів, і максимальна кількість цих зіткнень залежить виключно від співвідношення мас внутрішньої частинки та оболонки. Ці умови також отримано в цьому розділі. Була аналітично одержана матриця розсіювання структурно-складної частинки з бар'єром для  $N$ -кратних зіткнень:

$$\mathfrak{S}_{\text{int}(N)} = \begin{pmatrix} \cos(2(N-1)\alpha) & -\sqrt{\frac{M}{m}} \sin(2(N-1)\alpha) \\ -\sqrt{\frac{m}{M}} \sin(2(N-1)\alpha) & -\cos(2(N-1)\alpha) \end{pmatrix},$$

де  $\tan \alpha = \sqrt{\frac{M}{m}}$ , а  $N$  - кількість зіткнень оболонки з бар'єром до відбиття від нього. За наявності аналітичної матриці розсіювання були виявлені незвичайні режими розсіювання. Так встановлені умови, за виконанням яких швидкість відбитої частинки

може перевищувати швидкість її падіння на бар'єр. Зрозуміло, що всі закони збереження енергії та імпульсу виконуються точно. Цей режим можна інтерпретувати як охолодження внутрішніх ступенів свободи. Не менш незвичайним виглядає і режим у якому швидкість вибитої частинки на багато менше швидкості налітаючої частинки на бар'єр. Це особливо цікаво якщо згадати, що всі елементи, які входять в склад структурно-складної частинки, взаємодіють виключно абсолютно пружно. Цей режим інтерпретується як режим з нагрівом внутрішніх ступенів свободи. Наявність аналітично відомої матриці розсіювання дозволяють отримати коефіцієнт відновлення Ньютона. Він демонструє аномальні відмінності від коефіцієнту відновлення, відомого для макроскопічних тіл. Виявилось, що коефіцієнт відновлення залежить як від параметрів структурно складної частинки, так і від початкових швидкостей її елементів. Ще одна важлива характеристика аналітично отримана в цьому розділі – це час розсіювання на бар'єрі. Виявилось, що кінцевий час розсіювання чутливо залежить від початкових умов і може змінюватись у широкому діапазоні часу. Наявність таких аномалій розсіювання на бар'єрі дозволяє очікувати аналогічних ефектів і при зіткненні структурно-складних частинок з внутрішніми ступенями свободи. Таким чином, слід очікувати впливу невеликої кількості внутрішніх ступенів свободи на фізичні процеси, у яких мають місце зіткнення або розсіювання таких частинок.

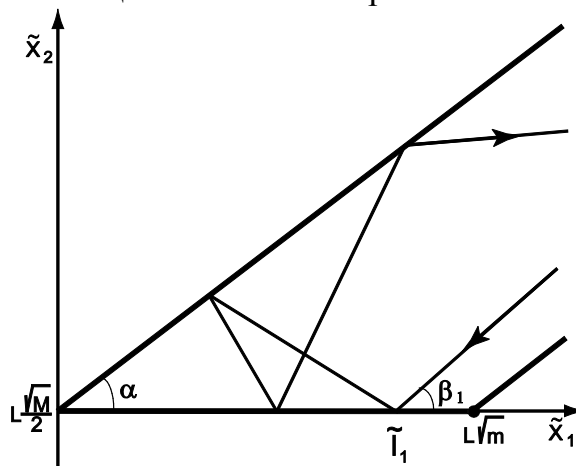


Рис.3. Область всередині смуги, що обмежена жирними лініями, є конфігураційним простором структурно-складної частинки, що стикається з бар'єром. Показаний приклад траєкторії відповідає двом зіткненням оболонки з бар'єром до її відбиття.  $\tilde{l}_1$  позначено відстані від вершини кута до точки першого зіткнення оболонки з бар'єром.

У третьому розділі виконано узагальнення структурно-складних частинок на випадок заряджених внутрішніх ступенів свободи. Таке узагальнення дозволяє розглянути незвичайні явища, що виникають під час руху таких часток у зовнішніх електричних полях. Для дослідження режимів руху таких частинок в постійних електричних полях більярдний формалізм був узагальнений на випадок заряджених внутрішніх ступенів свободи. У цьому формалізмі рух усіх компонент однозначно визначається рухом однієї точкової частинки в постійному ефективному полі у

багатовимірному більярді спеціальної форми. Істотне спрощення опису руху такої частинки досягається використанням запропонованого в дисертації узагальнення прийому Шварца «спрямлення» більярдної траєкторії. Цей прийом дозволяє перейти від руху частинки в полі в обмеженій області та відбиття її від границі до її руху в спеціальному полі, де частинка рухається вже в необмеженому середовищі. Такий прийом, як відомо, виявився надзвичайно ефективним для звичайних біліардів і широко застосовувався. Перенесення його на випадок наявності зовнішніх полів також виявляється досить ефективним і відкриває нові можливості дослідження біліардів у зовнішніх полях. У цьому розділі, використовуючи такий більярдний підхід, одержані всі режими руху структурно-складної частинки з одним і двома ступенями свободи в постійному електричному полі. Встановлено критерії реалізації цих режимів.

Для випадку структурно-складної частинки з одним ступенем свободи аналітично отримано динамічні відображення, які однозначно визначають поведінку усіх компонент такої структурно-складної частинки. Так у найбільш загальному випадку ці відображення мають вигляд:

$$\begin{aligned} V_{2n+1} &= V_{1n} - \frac{m_2 - m_1}{m_2 + m_1} \sqrt{(V_{1n} - V_{2n})^2 - \frac{2e_2 EL}{m_2}} \\ V_{1n+1} &= V_{1n} - \frac{2m_2}{m_2 + m_1} \sqrt{(V_{1n} - V_{2n})^2 - \frac{2e_2 EL}{m_2}} \\ V_{2n+2} &= V_{1n+1} + \frac{m_2 - m_1}{m_2 + m_1} \sqrt{(V_{1n+1} - V_{2n+1})^2 - \frac{2e_2 EL}{m_2}} \\ V_{1n+2} &= V_{1n+1} + \frac{2m_2}{m_2 + m_1} \sqrt{(V_{1n+1} - V_{2n+1})^2 - \frac{2e_2 EL}{m_2}}, \end{aligned}$$

де  $V_{1n}$  і  $V_{2n}$  швидкості оболонки і внутрішнього ступеню свободи в момент  $n$ -го зіткнення з лівою границею оболонки, а  $V_{1n+1}$  та  $V_{2n+1}$  швидкості оболонки і внутрішнього ступеню свободи в момент наступного зіткнення з правою границею оболонки. У випадку зіткнень тільки з однією стороною оболонки точні відображення спрощуються і приймають наступний вигляд:

$$\begin{aligned} V_{2n+1} &= \frac{2m_2}{m_2 + m_1} V_{1n} - \frac{m_2 - m_1}{m_2 + m_1} V_{2n} \\ V_{1n+1} &= \frac{3m_2 + m_1}{m_2 + m_1} V_{1n} - \frac{2m_2}{m_2 + m_1} V_{2n}, \end{aligned}$$

де  $V_{1n}$  і  $V_{2n}$  швидкості оболонки і внутрішнього ступеню свободи в момент  $n$ -го зіткнення, наприклад, з лівою границею оболонки.

Наявність точних динамічних відображень дозволяє виявити усі можливі режими рухів у постійному полі. Доведено, що прискорення оболонки може відбуватися за двома сценаріями. В одному з них прискорення оболонки відбувається періодично на певній «квант» швидкості. У другому сценарії присутні два «кванта» швидкості. Один збільшує швидкість, другий зменшує її так, що після одного періоду швидкість оболонки зростає.

Період таких змін визначається характеристиками оболонки і внутрішнього ступеня свободи. Така проста динаміка спостерігається, коли заряджений тільки внутрішній ступінь свободи. Якщо заряджена і оболонка, то характер її рухів залежить від характеру розподілу заряду по ній. У випадку, коли заряд рівномірно розподілений оболонкою, характер її руху зводиться до рівноприскореного руху з періодичною дискретною компонентною зміни швидкості як і у наведеному вище випадку. При локалізованому заряді в певній точці оболонки додатковий вплив дає кулонівська взаємодія. За допомогою узагальнення відомого принципу Шварца «спрямлення» траєкторій у цьому випадку також були виявлені можливі режими та була побудована біфуркаційна діаграма (рис.4) всіх можливих режимів руху. Виявилось, що існує незвичайний режим рухів, за яким внутрішня частинка не зіштовхується з оболонкою. При цьому вона може або коливатися навколо певної нерухомої точки відносно оболонки, або нескінченно тривалий час рухатися до одного з кінців оболонки. Останній режим можна назвати в певному розумінні «солітоноподібним».

Зі збільшенням кількості внутрішніх ступенів свободи основна зміна в поведінці оболонки пов'язана з появою хаотичних режимів. Також стають можливі і більш складні періодичні компоненти прискорення з великим спектром величин, на які відбувається зміна швидкості оболонки на одному періоді. Цікаво відзначити, що наявність періодичних компонент може бути важливою з точки зору створення випромінюючих нанопристроїв та забезпечення зміни частоти випромінювання таким нанопристроєм.

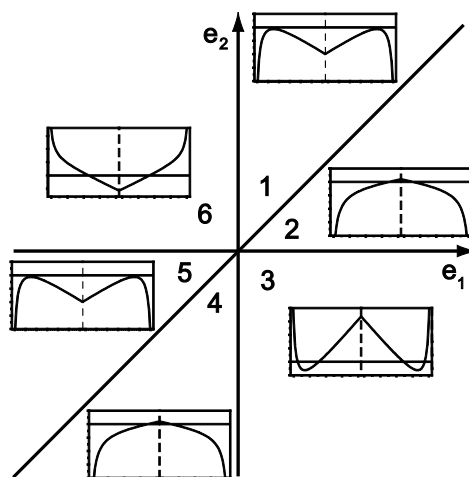


Рис.4. Біфуркаційна діаграма. Площина параметрів (зарядів)  $(e_1, e_2)$  розділена на сектори, в яких реалізуються якісно різні потенціали зовнішнього поля відповідно до узагальненого принципу Шварца. Типовий вид потенційної енергії на періоді показаний в кожному секторі. Нахилена лінія визначається рівнянням  $e_2 m_1 = e_1 m_2$ . Наведений вид біфуркаційної діаграми відповідає доданому електричному полю  $E > 0$ , біфуркаційну діаграму для  $E < 0$  легко отримати з наведеної зміною знаків зарядів на протилежні  $(e_1, e_2) \rightarrow (-e_1, -e_2)$ .

У четвертому розділі детально розглянуто випадок руху структурно-складної частинки з двома внутрішніми ступенями свободи в постійному електричному полі. Як показано в попередньому розділі, її рух можна звести до руху однієї точкової частинки в більярді трикутної форми і в постійному ефективному електричному полі.

Така задача має і самостійний інтерес, пов'язаний з рухом заряджених частинок в порожнинах. Цей тип задач виникає, наприклад, при дослідженні динамічної провідності в наносистемах різної форми. Тому у цьому розділі запропоновано новий підхід до точного опису руху зарядженої частинки в порожнині трикутної форми в постійному електричному полі. Основу цього підходу становить введений фазовий простір, в якому кожному параболічному сегменту траєкторії співзставляється точка фазового простору (Рис.5).

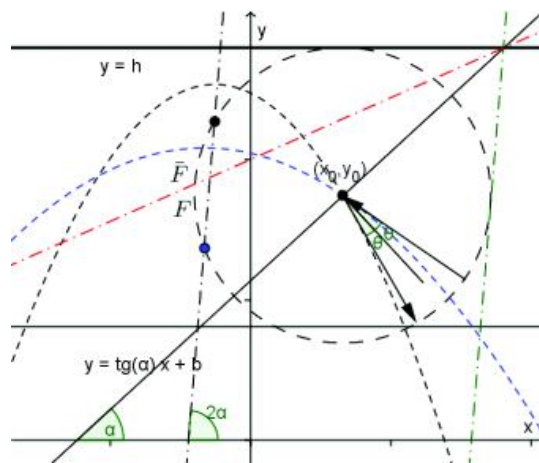


Рис.5. Частина траєкторії частинки, що демонструє відбиття від прямої, що відповідає деякій стороні трикутника. Геометрія розташування фокусів параболічних сегментів до і після відбиття і характерні прямі також наведені на малюнку. Видно, що фокуси розташовуються на колі з центром в точці відображення та торкаються директриси  $y = h$ .

Доведено, що в якості такої точки достатньо використовувати положення фокусу параболічного сегменту траєкторії. Фазовий простір, який виникає у цьому випадку, має вигляд обмеженої частини двомірної площини, яка обмежена сегментами кола та відрізків прямих (див. Рис.5). У деяких випадках у фазовому просторі з'являються лакуни, тобто зони, у яких відсутні сегменти траєкторії. Такий фазовий простір виявився зручним для дослідження траєкторій руху зарядженої частинки в зовнішньому полі в трикутній області. Для дослідження поведінки такої частинки аналітично отримано точне динамічне відображення, що визначає рух частинки в цьому фазовому просторі. Одна з компонент такого відображення від однієї з сторін трикутника має вигляд:

$$x_{F_{n+1}} = x_{F_n} - (y_{F_n} - y_{F_{n+1}}) \cot 2\alpha$$

$$y_{F_{n+1}} = \frac{8k^3 x_{F_n} + (1 - 2k^2 + 5k^4) y_{F_n} + 8k^2 b}{(1 + k^2)^2} + \frac{4k}{1 + k^2} (-hk \mp \sqrt{D}),$$

де  $k = \tan \alpha$ ,  $b$  параметри, які визначають положення сторони, від якої відбувається відбиття, а функція  $D$  визначається як

$$D = (h - y_{F_n})(-2b + h(1 + k^2)) - (1 - k^2)y_{F_n} - 2kx_{F_n}$$

Таким чином, динаміка частинки однозначно визначається композицією трьох аналогічних відображень, які відповідають відбиттю від кожної з сторін трикутника. Наявність точного динамічного відображення, в свою чергу, дозволило встановити загальні властивості як траєкторій, так і фазових портретів такої динамічної системи. Використовуючи динамічне відображення, встановлені можливі режими руху. Типовим випадком є хаотичне поведіння частинки. Показано наявність перемежаємого хаосу поряд зі звичайним хаосом, типовим для гамільтонових систем (рис.6). Детально досліджено випадок сильних полів, у якому відбиття частинки відбувається тільки від двох сторін трикутника. Встановлено геометричні критерії, які дозволяють встановити положення та характерну форму острівця стійкості у хаотичному морі в фазовому просторі. Отримані характеристики визначають властивості ламінарних – періодичних та квазіперіодичних режимів. Чисельні експерименти добре узгоджуються з передбаченими закономірностями.

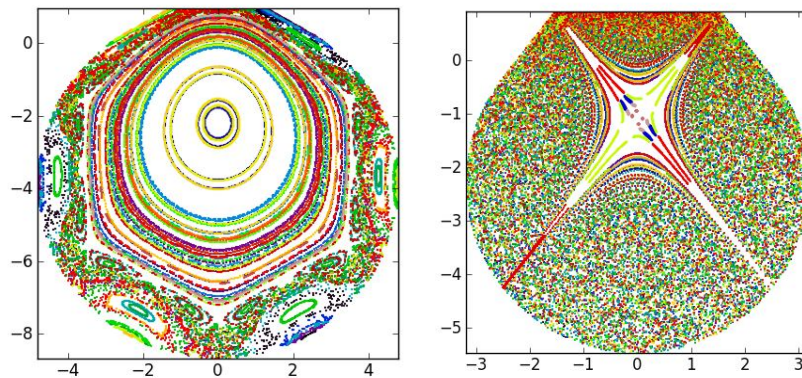


Рис.6. Типовий вигляд фазового портрету, аналогічного звичайному, для гамільтонових систем хаотичному морі з острівцями стійкості зліва. Справа фазовий портрет з режимом хаотичності, що відповідає перемежаємому хаосу.

Отримані результати опису траєкторій та динаміки структурно-складної частинки дозволили в цьому розділі розглянути властивості випромінювання структурно-складної частинки в постійному полі з єдиним зарядженим внутрішнім ступенем свободи. Використовуючи визначену траєкторію рухів зарядженої компоненти структурно-складної частинки, був отриманий спектр її випромінювання і показано, що потужність випромінювання структурно-складної частинки  $P_{comp}$  перевищує на порядки потужність випромінювання  $P_{solid}$  еквівалентної, але безструктурної частинки. Це можна виявити із співвідношення для коефіцієнта

ефективності випромінювання структурно-складної частинки:

$$\eta = \frac{P_{comp}}{P_{solid}} = \frac{a_{col}^2 \tau}{\pi \dot{v}^2 \tau_{col}} \sim \frac{\tau}{\tau_{col}},$$

де  $\tau$  – характерний час зіткнення внутрішньої частинки з оболонкою, а  $\tau_{col}$  – період коливань внутрішньої частинки. Встановлена залежність основних характеристик спектру випромінювання від параметрів структурно-складної частинки.

Детально досліджено вплив тертя об середовище на процес випромінювання. Встановлено універсальний режим руху і випромінювання структурно-складної частки в середовищі з тертям. Виявилось, що в безрозмірному вигляді рівняння для відображення залежать від єдиного параметра. Був також розглянутий асимптотичний випадок  $\mu \gg 1$  і порівняно точний спектр з асимптотичним.

У п'ятому розділі модель структурно-складних частинок з внутрішніми ступенями свободи узагальнена на тривимірний випадок. Внутрішні частинки розміщені в оболонці відіграють роль внутрішніх ступенів свободи. Сферична оболонка радіуса  $R_0$  має масу  $m_0$ . Внутрішні частки радіусів  $R_i \ll R_0$  мають маси  $m_i$  і можуть стикатися з оболонкою та одна з одною абсолютно пружно. Індекс  $i = 1, \dots, N$  нумерує внутрішні ступені свободи (Рис.7). Використовуючи таку модель, встановлено кінематичні властивості частинок, що мають невелику кількість внутрішніх ступенів свободи.

Для дослідження таких структурно-складних частинок, опису їх руху і зіткнень був запроваджений більярдний підхід. В цьому підході усім компонентам структурно-складної частинки однозначно співзв'язується рух однієї точковою частинки у багатовимірному біліарді. Встановлено форму такого біліарду. Було показано, що конфігураційний простір композитної частинки визначається перетином зовнішніх частин  $N(N-1)/2$  циліндрів і внутрішніх частин  $N$  циліндрів.

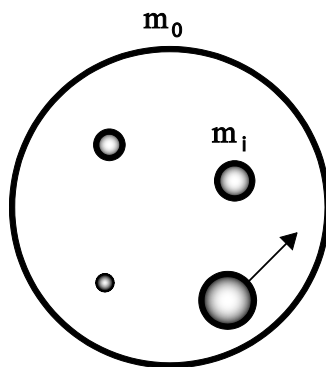


Рис.7. Перетин структурно-складної частинки з декількома внутрішніми частинками різних радіусів та мас.

Наявність таких границь доводить існування хаотичних режимів руху з показником Ляпунова, відмінним від нуля. Аналітично повністю розв'язана задача з єдиним внутрішнім ступенем свободи. Знайдені кінематичні режими руху частинки з

єдиним внутрішнім ступенем свободи і виявлені режими руху частинок з великою кількістю внутрішніх ступенів свободи. Зі збільшенням внутрішніх ступенів свободи типовими стають хаотичні режими рухів.

Виявлено незвичайний режим блукання частинки. На відміну від звичайного броунівського блукання, коли випадкові сили штовхають частинку зовні, в цьому випадку блукання відбувається за рахунок внутрішніх випадкових поштовхів. Встановлено закони руху частинки й з більш ніж одним числом внутрішніх ступенів свободи. Отримано співвідношення для середньоквадратичного відхилення оболонки від центру інерції:

$$\Delta r_0 \approx (R_0 - R) \sqrt{\frac{m^2 N}{(m_0 + Nm)^2}}.$$

Важливо відзначити, що величина зміщення падає зі збільшенням кількості внутрішніх ступенів свободи  $\Delta r_0 \sim 1/\sqrt{N}$ , і тому для макроскопічних тіл таке зміщення зникає. Тому цей ефект повинен спостерігатися для частинок лише з невеликою кількістю внутрішніх ступенів свободи.

Отримано співвідношення між енергією оболонки і енергією внутрішніх ступенів свободи. Передбачений вихід на рівномірний розподіл за енергією внутрішніх ступенів свободи. Передбачено хаотичне розсіювання таких частинок. Також було з використанням чисельних експериментів знайдено співвідношення між енергією оболонки і внутрішніми ступенями свободи в системі центру інерції

$$\frac{E}{E_0} \approx \frac{m_0}{M_{in}} \left( 1 + N \frac{M_m^2}{m_0^2} \right).$$

Чисельним моделюванням виявлені і більш складні режими рухів внутрішніх частинок, які відповідають збереженню кореляції між рухами деяких груп внутрішніх частинок.

Слід підкреслити, що закономірності, виявлені в цій простій моделі, мають спостерігатися і в звичайних нанорозмірних тілах, для яких число внутрішніх ступенів свободи стає відносно невеликим. Таким чином, ефекти впливу внутрішніх ступенів свободи мають важливе значення і мають враховуватись у різноманітних фізичних процесах, які пов'язані не лише з рухами частинок з внутрішніми ступенями свободи, а і з процесами розсіювання та їх взаємодії.

## ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ ТА ВИСНОВКИ

У дисертаційній роботі запропоновано нові підходи до опису складних частинок з внутрішніми ступенями свободи та виявлено їх нові загальні та фундаментальні властивості. Досліджено кінематичні та динамічні властивості таких частинок. Отримано такі головні наукові результати:

1. Запропоновано одновимірну модель структурно-складної частинки з внутрішніми ступенями свободи. Розвинуто біліардний підхід для дослідження



властивостей таких структурно-складних частинок. Виявлено можливі кінематичні режими руху таких частинок та їх властивості. У разі двох внутрішніх ступенів свободи встановлені всі можливі режими рухів таких частинок.

2. Побудовано теорію відбиття частинок з внутрішніми ступенями свободи від бар'єра. Виявлено ефект багаторазових зіткнень такої частинки з бар'єром до її відбиття. Отримано закони відбиття частинок з внутрішніми ступенями свободи, які відрізняються від законів відбиття безструктурних частинок. Показаний аномальний характер залежності коефіцієнта відновлення від швидкості частинки. Встановлено можливі режими відбиття частинок з внутрішніми ступенями свободи від бар'єра. Доведено існування аномальних режимів відбиття структурно-складних частинок від бар'єра, в яких швидкість частинки після відбиття перевищує її швидкість до зіткнення з бар'єром.

3. Узагальнено більярдний підхід до опису динамічних режимів руху частинок з внутрішніми ступенями свободи в постійних зовнішніх полях. Запропоновано новий підхід до опису динаміки таких частинок у фазовому просторі фокусів параболічних сегментів. Отримано аналітично динамічне відображення руху структурно-складної частинки з двома внутрішніми ступенями свободи в постійному полі. Встановлено нові режими руху таких частинок з невеликою кількістю внутрішніх ступенів свободи в постійному електричному полі та критерії їх реалізації. Показано виникнення двох типів хаотичних режимів: сильний хаос і перемежаємість.

4. Встановлено властивості випромінювання структурно-складної частинки з одним зарядженим внутрішнім ступенем свободи. Одержано спектр випромінювання і доведено, що потужність випромінювання перевищує на порядки потужність випромінювання еквівалентної безструктурної частинки. З'ясовано вплив тертя середовища на спектр випромінювання такою структурно-складною частинкою.

5. Запропоновано тривимірну модель структурно-складної частинки з внутрішніми ступенями свободи й відповідний біліардний формалізм. З'ясовано властивості ефективного багатовимірного біліярда. Досліджено аналітично режими руху з одним внутрішнім ступенем свободи. Доведено, що для частинок з великою кількістю внутрішніх ступенів свободи типовими є хаотичні режими руху. Виявлено режим незвичайного хаотичного блукання структурно-складної частинки. Встановлено закон розподілу енергії за внутрішніми ступенями свободи.

## ПЕРЕЛІК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

1. Яновский В. В. Столкновение структурно-сложной частицы с барьером / В. В. Яновский, А. В. Тур, **Ю. Н. Масловский** // ЖЭТФ. — 2008. — Т. 133, № 1. — С. 1–17.
2. Yanovsky V. V. A charged composite particle in a constant electric field / V. V. Yanovsky, Tur A. V., **Yu. N. Maslovsky** // Theoretical and Mathematical Physics. — 2013. — Vol. 175, no. 2. — P. 655–680

3. Emission of composite particles in a constant electric field / S. V. Slipushenko, V. V. Yanovsky, A. V. Tur, **Yu. N. Maslovsky** // East European Journal of Physics. — 2014. — Vol. 1, no. 4. — P. 26–30.
4. 3D composite particle / S. V. Slipushenko, V. V. Yanovsky, A. V. Tur, **Yu. N. Maslovsky** // Functional Materials. — 2015. — Vol. 22, no. 1. — P. 69–78.
5. Triangular billiard in a constant field / **Yu. N. Maslovsky**, S. V. Slipushenko, A. V. Tur, V. V. Yanovsky // Functional Materials. — 2015. — Vol. 22, no. 2. — P. 47–54.
6. **Масловський Ю. Н.** Композитна частица во внешнем поле и ее излучение / **Ю. Н. Масловский**, С. В. Слипушенко, В. В. Яновский // VII Международная школа-семинар молодых ученых “Рост кристаллов”, тезисы докладов. — Украина, Харьков, 2013. — С. 13.
7. Slipushenko S. V. Radiation of charged particle in an external electrical fields / S. V. Slipushenko, **Yu. N. Maslovsky** // V Young Scientists Conference, Problems of Theoretical Physics: Program & Proceeding. — Ukraine, Kyiv, 2013. — P. 94.
8. Emission of composite particles in a constant electrical fields. / **Yu. N. Maslovsky**, S. V. Slipushenko, A. V. Tur, V. V. Yanovsky // Ukrainian-German Symposium of Physics and Chemistry of Nanostructures and Nanobiotechnology: book of abstracts. — Ukraine, Kyiv, 2015. — P. 166.
9. **Maslovsky Yu. N.** A charged composite particle in constant electric field / **Yu. N. Maslovsky**, V. V. Yanovsky // 4th International Scientific and Technical Conference for Young Scientists “ Luminescent processes in condensed state of matter ”: book of abstract. — Ukraine, Kharkiv, 2015. — P. 56.
10. Maslovsky Yu. N. A scattering of structurally complex particles / **Yu. N. Maslovsky**, S. V. Slipushenko, V. V. Yanovsky // International Meeting on Clusters and Nanostructured Materials (CNM-4): program & materials. — Ukraine, Uzhgorod, 2015. — P. 36.

## АНОТАЦІЯ

**Масловський Ю. М. Фізичні властивості структурно-складних частинок.** - Рукопис.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 - теоретична фізика. - Інститут монокристалів НАН України, Харків, 2015.

Дисертація присвячена вивченню процесів і пошуку нових ефектів, що відбуваються зі структурно-складними системами, які мають внутрішні ступені свободи. У дисертації запропоновані прості моделі таких структурно-складних частинок та розвинуто ефективний підхід дослідження їх властивостей, який не спирається на термодинамічний формалізм.

Було розглянуто одновимірні моделі структурно-складних частинок. Виявлено

можливі кінематичні режими їх рухів та зміни, які виникають зі збільшенням кількості внутрішніх ступенів свободи, використовуючи як аналітичні, так і чисельні методи. Виявилось, що у структурно-складних частинок при виконанні визначених у дисертації умов коефіцієнт відновлення може приймати значення більші за 1, і в такому випадку виникають аномальні режими відбиття.

Методи дослідження було поширено на структурно-складні частинки з зарядженими внутрішніми ступенями свободи. Отримано незвичайні режими рухів таких частинок у постійних електричних полях. Одержано спектр випромінювання. Запропонована тривимірна модель структурно-складної частинки з внутрішніми ступенями свободи й відповідний біліардний формалізм. З'ясовано властивості ефективного багатовимірного біліарда. Виявлено режим незвичайного хаотичного блукання структурно-складної частинки. Встановлено закон розподілу енергії за внутрішніми ступенями свободи.

**Ключові слова:** структурно-складні частинки, пружне відбиття, внутрішні ступені свободи, біліард, фазовий простір, зовнішнє поле, хаотичність, режими рухів, випромінювання.

## АННОТАЦІЯ

**Масловский Ю. М. Физические свойства структурно-сложных частиц.**

Рукопись.

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 - теоретическая физика. - Институт монокристаллов НАН Украины, Харьков, 2015.

Диссертация посвящена изучению процессов и поиску новых эффектов, которые возникают с участием структурно-сложных систем с внутренними степенями свободы. К таким системам, кроме искусственно созданных наносистем, таких как нанопоры, можно отнести и обычные частички материала, когда их размеры существенно уменьшаются. Уменьшение размеров частицы ведет к достижению столь малых размеров, что неизбежно возникают эффекты, связанные с небольшим количеством внутренних степеней свободы. Предложены простые модели таких структурно-сложных частиц и развит эффективный подход к исследованию их свойств, который не основан на термодинамическом формализме.

Были рассмотрены одномерные модели структурно-сложных частиц. Обнаружены возможные кинематические режимы движения и изменения их, возникающие с увеличением числа внутренних степеней свободы, используя как аналитические, так и численные методы. Особенно эффективным оказался предложенный биллиардный подход к описанию структурно-сложных частиц с внутренними степенями свободы, который распространен и на отражение таких частиц от барьера. Именно этот подход позволил получить аналитически матрицу отражения частицы от барьера. Полученные результаты позволили получить

необычные свойства такого отражения. Доказано, что отражение структурно-сложной частицы происходит только после некоторого конечного числа столкновений с барьером. Количество таких столкновений зависит от параметров структурно-сложной частицы и получено в диссертации. Кроме этого, обнаружено, что скорость отражения от барьера также существенно зависит от них. Поэтому коэффициент восстановления существенно зависит от параметров структурно-сложной частицы и от ее скорости падения на барьер. Это принципиально отличается от свойств коэффициента восстановления макроскопических тел, для которых он не зависит от скорости падения на барьер, а только от свойств материалов. Для макроскопических тел он принимает значения от 0 для абсолютно неупругих столкновений, до 1 при абсолютно упругих столкновениях. Доказано, что для структурно-сложных частиц коэффициент восстановления при определенных условиях, установленных в диссертации, может превышать 1. В таком случае возникает аномальный режим отражения, при котором скорость отражения превышает скорость падения на барьер. Очевидно, что все законы сохранения выполняются и в этом случае. Такой режим отражения соответствует случаю охлаждения внутренних степеней свободы.

Развитые методы исследований распространены и на структурно-сложные частицы с заряженными внутренними степенями свободы. Получены необычные динамические режимы движения таких частиц в постоянном электрическом поле. Доказано, что структурно-сложная частица в постоянном электрическом поле является эффективным источником излучения. Получен ее спектр излучения и показано, что ее мощность излучения превосходит на порядки мощность излучения эквивалентной бесструктурной частицы. Предложена трехмерная модель структурно-сложной частицы с внутренними степенями свободы и развит соответствующий билиардный формализм. Установлены свойства эффективного многомерного билиарда. Аналитически получены режимы движения такой частицы с одной внутренней степенью свободы. Доказано, что с увеличением числа внутренних степеней свободы типичными становятся хаотические режимы движения. Обнаружен необычный режим хаотического блуждания структурно-сложной частицы. Установлен закон распределения энергии по внутренним степеням свободы.

**Ключевые слова:** структурно-сложная частица, упругое отражение, внутренние степени свободы, билиард, фазовое пространство, внешнее поле, хаотичность, режимы движения, излучение.

## ABSTRACT

**Maslovsky Y.M. Physical properties of structurally complex particles.** The manuscript.

The dissertation for a candidate degree on Physics and Mathematics, specialty 01.04.02 - theoretical physics. - Institute for Single Crystals NAS of Ukraine, Kharkiv, 2015.

Thesis deals with the search for new processes and effects that occur with structurally

complex systems that have internal degrees of freedom. The thesis proposed a simple model of structurally complex particles and an effective approach is developed to the study of their properties, which is not based on thermodynamic formalism.

One-dimensional structural models of complex particles are considered. Possible kinematic modes of their movements and changes that occur with increasing number of internal degrees of freedom are discovered, using both analytical and numerical methods. It turned out that structurally complex particles when performing these conditions specified in the recovery factor can take values greater than 1 and in this case there are abnormal modes of reflection when the reflection speed greater than the rate of fall on the barrier.

Methods were extended to structurally complex charged particles with internal degrees of freedom. Unusual modes of movement of particles in constant electric fields are discovered. The emission spectrum is obtained. Three-dimensional structural model of the complex particle with internal degrees of freedom and a billiard appropriate formalism is proposed. Mode of unusual chaotic random walk of structurally complex particle is detected. The law of distribution of energy for internal degrees of freedom is detected.

**Key words:** structurally complex particle, elastic reflection, internal degrees of freedom, billiard, phase space, external field, chaotic, modes of motion, radiation.