

УДК 612.13

М.А. Бубенчиков

**ДВИЖЕНИЕ НАНОТРУБОК В ВОЗДУШНОЙ СРЕДЕ
ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ**

В работе описана динамика нанотрубок как цельных недеформируемых структур, имеющих собственный магнитный момент за счет наличия в них интеркалированного железа. Теоретически определена сила сопротивления, обусловленная ударами молекул воздушной среды о рассматриваемую частицу. Построено асимптотически точное решение задачи о движении трубки в среде с сопротивлением. Численно определен характер вращения трубки около центра масс, возникающий из-за несовпадения начальной ориентации трубки и вектора внешнего магнитного поля.

Ключевые слова: *углеродные нанотрубки, интеркалированное железо, собственный магнитный момент, вращение нанотрубки, сопротивление наночастицы в газообразной среде.*

Эйлерово описание движения

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

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

Момент инерции относительно собственной оси трубки можно принять равным моменту инерции однородного сплошного кругового цилиндра относительно его геометрической оси.

Примем, что величина силы сопротивления линейно зависит от скорости движения частицы u :

$$F_{\text{сопр}} = 2M\beta u. \tag{1}$$

Здесь M – масса частицы, β – коэффициент сопротивления. В дальнейшем же покажем, что характер зависимости сопротивления от скорости именно такой.

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

$$\left. \begin{aligned} A \frac{dp}{dt} + (C - A)qr &= L_x^{(e)} + M_{\text{сопр}(x)}, \\ A \frac{dq}{dt} + (A - C)pr &= L_y^{(e)} + M_{\text{сопр}(y)}, \\ C \frac{dr}{dt} &= L_z^{(e)} + M_{\text{сопр}(z)}. \end{aligned} \right\} \tag{2}$$

Здесь C и A – моменты инерции нанотрубки относительно соответственно собственной оси трубки и перпендикулярной ей оси, проходящей через ее центр масс.

Пусть задано внешнее магнитное поле $\vec{B} = (B_\xi, B_\eta, B_\zeta)$ в виде совокупности проекций на оси неподвижной системы отсчета. Тогда момент активных сил, вращающих нанотрубку, определится следующим образом [2]:

$$\vec{L}^{(e)} = \mu [\vec{k}, \vec{B}]. \quad (3)$$

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

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

$$\vec{L}^{(e)} = \mu [\vec{k}, \vec{B}] = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ 0 & 0 & \mu \\ B_x & B_y & B_z \end{vmatrix} = -\vec{i} (\mu B_y) + \vec{j} (\mu B_x) + \vec{k} (0). \quad (4)$$

Как видим, проекция момента магнитных сил на собственную ось трубки $L_z^{(e)}$ оказалась равной нулю. То же, как будет показано ниже, относится и к моменту сопротивления: $M_{\text{сопр}(z)} = 0$. Поэтому последнее уравнение системы (2) дает первый интеграл $r = r_0 = \text{const}$. Проблема представления компонент B_x и B_y через B_ξ, B_η, B_ζ решена в работах [3, 4].

Расчет силы сопротивления

Прежде чем начать вычисления сопротивления, сделаем несколько упрощающих предположений:

1. Изначально предполагаем, что все молекулы, окружающие наночастицу и двигающиеся по отношению к этой частице в различных направлениях, имеют одинаковую по величине среднестатистическую скорость теплового движения v_t .

2. Далее полагаем, что $R = v_t \Delta t \gg l$. Здесь R – путь, пройденный молекулой за выбранный промежуток времени Δt , l – линейный размер наночастицы.

3. Рисуем сферу радиуса R . В ее центр помещаем наночастицу. Эту сферу назовем сферой влияния, поскольку все молекулы окружающей среды, находящиеся внутри этой сферы или на ее поверхности, скорости которых имеют направление на частицу, обязательно ее достигнут.

4. Все молекулы, находящиеся в сфере влияния, делим на равноплотные пучки параллельно двигающихся молекул, причем каждый пучок будет содержать равномошные группы молекул, двигающиеся в противоположных направлениях.

5. При расчете силы сопротивления в задаче динамики наночастицы действительный объем (в нашем случае сфера влияния) имеет линейные размеры, определяемые длиной свободного пробега молекул воздуха при нормальных условиях: $\lambda \approx 6,21 \cdot 10^{-8}$ м. Этот объем содержит ~ 28200 молекул, поэтому в дальнейшем будет использоваться не интегральный, а алгебраический подход к исчислению количества движения системы.

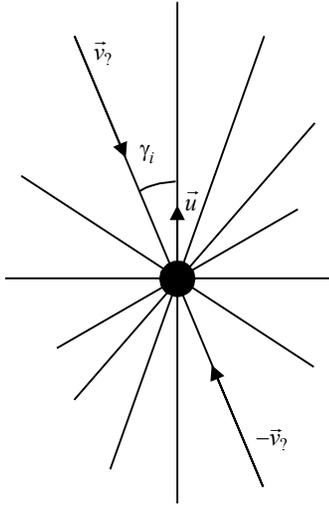


Рис. 1. Связка осей молекулярных пучков, проходящих через наночастицу

6. Силы Ван-дер-Ваальса, являющиеся по своей природе консервативными, не вносят вклада в диссипативный процесс сопротивления, поэтому, в дальнейшем, они не будут учитываться.

Пусть в сфере влияния находится N молекул, а в каждом i -м пучке N_i молекул, двигающихся в одном из двух направлений, тогда

$$\sum_{i=1}^k N_i = \frac{N}{2},$$

где k – общее число пучков.

Поскольку наночастица находится в центре сферы влияния, то ось каждого из пучков будет проходить через рассматриваемую частицу.

Проведем расчет силы сопротивления наночастицы, двигающейся по инерции и под действием лишь пассивной силы сопротивления. Уравнение теоремы о количестве движения для частицы, спроецированное на направление движения частицы, запишется следующим образом:

$$\Delta Q = F_{\text{сопр}} \Delta t. \quad (5)$$

Левую часть (5) можно представить как сумму следующих количеств движения:

$$\Delta Q = \sum_{i=1}^k \Delta Q_i = \sum_{i=1}^k (v_i^+ - v_i^-) N_i m \delta. \quad (6)$$

Здесь m – масса молекулы газа; v_i^+ , v_i^- – скорости молекул с фронтальной и тыльной частей относительно движущейся частицы.

Спроецируем скорости встречных потоков молекул, принадлежащих одному пучку, на направление движения частицы. Тогда скорости фронтальных и тыльных частиц будут иметь следующую величину:

$$v_i^+ = \cos \gamma_i v_\tau + u, \quad v_i^- = \cos \gamma_i v_\tau - u, \quad (7)$$

где v_τ – скорость теплового движения молекул, u – средняя скорость частицы. Подставляя (7) в (6), найдем

$$\Delta Q = \sum_{i=1}^k (v_i^+ - v_i^-) N_i m \delta = 2um\delta \sum_{i=1}^k N_i = 2um \frac{N}{2} \delta = umN\delta. \quad (8)$$

Здесь $\delta = \frac{S_3}{\pi R^2}$ – доля столкнувшихся с поверхностью частицы молекул (одинаковая для всех пучков), S_3 – эффективное сечение столкновения с частицей, πR^2 – размер центрального сечения сферы влияния (он же – поперечный размер пучка молекул).

Величина N , входящая в последнее соотношение, определяется следующим образом:

$$N = \frac{4}{3} \pi R^3 N_L^{(\text{норм})}. \quad (9)$$

Здесь $N_L^{(\text{норм})}$ – число Лошмита, определяющее число частиц в единице объема газа, находящегося при нормальных условиях.

Таким образом, левая часть (5) переписывается в виде

$$\Delta Q = \frac{4}{3} um N_L^{(\text{норм})} S_3 \cdot v_\tau \Delta t . \quad (10)$$

Приравнявая ее правой части, записанной через коэффициент сопротивления, получим

$$\frac{4}{3} um v_\tau N_L^{(\text{норм})} S_3 \cdot \Delta t = 2M\beta u \Delta t .$$

Откуда окончательно для размерного коэффициента сопротивления, введенного формулой (1), найдем

$$\beta = \frac{2}{3} \frac{m}{M} N_L^{(\text{норм})} S_3 v_\tau . \quad (11)$$

Определение момента сопротивления трубки

Предварительно вычислим величину сопротивления участка нанотрубки размера dz при ее вращении около центра масс с угловой скоростью $\vec{\omega}$:

$$\vec{F}_{\text{сопр}}(dz) = -M\vec{v}\beta' dz = -M[\vec{\omega}, \vec{kz}] \beta' dz . \quad (12)$$

Здесь $\vec{v} = [\vec{\omega}, \vec{kz}]$ – локальная линейная скорость рассматриваемого участка трубки, $\vec{\omega} = (p, q, r)$ – вектор мгновенной угловой скорости трубки,

$$\beta' = \frac{2}{3} \frac{m}{M} v_\tau N_L^{(\text{норм})} d_3 ,$$

d_3 – эффективный диаметр трубки. Раскрывая в (12) векторное произведение для проекций силы $\vec{F}_{\text{сопр}}(dz)$, найдем

$$F_{\text{сопр}(x)}(dz) = -M\beta' qz dz, \quad F_{\text{сопр}(y)}(dz) = M\beta' pz dz, \quad F_{\text{сопр}(z)}(dz) = 0. \quad (13)$$

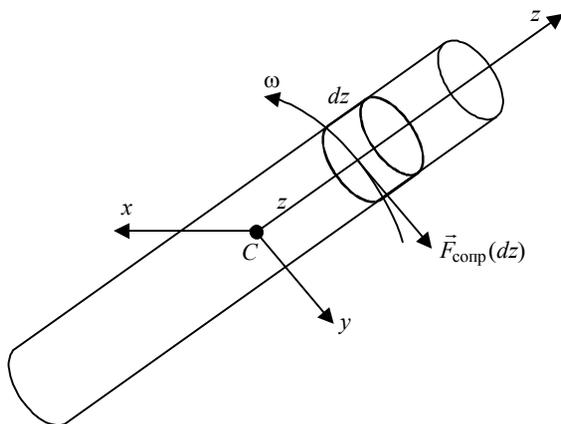


Рис. 2. К расчету момента сопротивления

В динамические уравнения (2) входит не собственно сила сопротивления $\vec{F}_{\text{сопр}}(dz)$, действующая на фрагмент размером dz , а момент этой силы, взятый относительно центра подвижной системы отсчета. Причем эта величина должна быть проинтегрирована по всей длине трубки:

$$\vec{M}_{\text{сопр}} = 2 \int_0^{l/2} [\vec{k}z, \vec{F}_{\text{сопр}}(dz)]. \quad (14)$$

Подынтегральную функцию как векторное произведение можно представить через скалярные компоненты следующим образом:

$$[\vec{k}z, \vec{F}_{\text{сопр}}(dz)] = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ 0 & 0 & z \\ -(Qzdz) & (Pzdz) & 0 \end{vmatrix} = -(Pz^2dz)\vec{i} - (Qz^2dz)\vec{j} + (0)\vec{k}. \quad (15)$$

Здесь $P = M\beta'p$, $Q = M\beta'q$.

Проводя интегрирование в (14) и учитывая при этом (15), найдем

$$M_{\text{сопр}(x)} = -Abp, \quad M_{\text{сопр}(y)} = -Abq, \quad M_{\text{сопр}(z)} = 0. \quad (16)$$

Здесь введено обозначение $b = \beta'l$, $[b] = c^{-1}$, $A = Ml^2/12$ – момент инерции трубки относительно оси, проходящей через центр масс и перпендикулярно ее боковой поверхности.

Асимптотически точное аналитическое решение

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

С учетом этого первое и второе уравнения (2) запишутся в виде

$$\frac{dp}{dt} = -2bp - n^2 \sin \theta; \quad (17)$$

$$\frac{dq}{dt} = -2bq. \quad (18)$$

Здесь $n^2 = \frac{\mu B}{A}$, $[n] = c^{-1}$. Величина n представляет собой частоту собственных колебаний трубки как недеформируемой структуры около направления вектора внешнего магнитного поля. Из кинематических соотношений Эйлера будем иметь

$$p = \dot{\theta}. \quad (19)$$

При $p(0) = q(0) = 0$ из уравнения (18) следует, что $q = 0$ во все время движения, то есть поворот вокруг оси $0y$ будет отсутствовать или, другими словами, движение трубки будет плоским и осуществляться в плоскости $0\zeta\eta$.

Подставляя (19) в (17) найдем

$$\ddot{\theta} = -n^2 \sin \theta - 2b\dot{\theta}. \quad (20)$$

Уравнение (20) является нелинейным относительно θ , и существует проблема в нахождении его аналитического решения. Как ни странно, если бы зависимость момента сопротивления от угловой скорости была бы квадратичной, то можно было бы указать замену переменных, позволяющую выделить точное решение. При линейной же зависимости трения от скорости можно построить точное решение лишь в асимптотическом смысле, то есть при $\theta \rightarrow 0$. Полагая в (20) (при малых θ) $\sin \theta \approx \theta$, получим следующее уравнение движения трубки:

$$\ddot{\theta} + 2b\dot{\theta} + n^2\theta = 0. \quad (21)$$

Решение последнего уравнения будем искать в виде $\theta = \exp(\alpha t)$. Подставляя это выражение в однородное уравнение (21) и сокращая на общий множитель $\exp(\alpha t)$, приходим к характеристическому уравнению для α :

$$\alpha^2 + 2b\alpha + n^2 = 0, \quad (22)$$

корни которого определяются следующими выражениями:

$$\alpha_{1,2} = -b \pm \sqrt{b^2 - n^2}.$$

В рассматриваемом нами случае $b > n$. Поэтому корни (23) будут действительными и отрицательными. Общий интеграл уравнения (21) будет иметь вид

$$\theta = C_1 \exp(\alpha_1 t) + C_2 \exp(\alpha_2 t). \quad (24)$$

Здесь C_1, C_2 – постоянные интегрирования, которые находим из начальных условий

$$\theta(0) = \theta_0, \quad \dot{\theta}(0) = 0.$$

В результате получим

$$C_1 = \frac{\alpha_2 \theta_0}{\alpha_2 - \alpha_1}, \quad C_2 = \frac{\alpha_1 \theta_0}{\alpha_1 - \alpha_2}.$$

Оценка значений исходных параметров

Первые два из уравнений системы (2) можно переписать следующим образом:

$$\frac{dp}{dt} = qr_0 + n^2 [\vec{k}, \vec{e}]_x - 2bp; \quad (25)$$

$$\frac{dq}{dt} = pr_0 + n^2 [\vec{k}, \vec{e}]_y - 2bq. \quad (26)$$

Здесь \vec{k}, \vec{e} – безразмерные единичные векторы, причем \vec{k} направлен по оси трубки, \vec{e} показывает направление вектора внешнего магнитного поля.

Оценим численные значения коэффициентов, входящих в (25), (26). Прежде всего определим порядок частоты собственных колебаний $n = \sqrt{\frac{\mu B}{A}}$. В последнюю формулу входит μ – величина собственного магнитного момента нанотрубки. Принимаем, что этот параметр зависит от количества атомов интеркалированного железа. В дальнейшем будем проводить расчеты для $\mu = (1 \div 100) \mu_{Fe}$, причем известно, что $\mu_{Fe} \approx 7 \cdot 10^{-21}$ Дж/Тл.

Далее, момент инерции нанотрубки относительно оси, проходящей через ее центр масс перпендикулярно оси симметрии $A = \frac{Ml^2}{12}$, где M – масса нанотрубки, l – ее длина. В расчетах принимаем $M = 2,4 \cdot 10^{-22}$ кг, $l = 5 \cdot 10^{-5}$ м, $d = 1,8 \cdot 10^{-9}$ м (диаметр нанотрубки), магнитная индукция Земли $B = 5 \cdot 10^{-5}$ Тл. Следовательно, величина параметра n для случая $\mu = 100\mu_{Fe}$ будет равна $n = 2,65 \cdot 10^4$ с $^{-1}$.

Теперь оценим величину коэффициента сопротивления. Принимая, что $d_s = d$ и $v_\tau = 4 \cdot 10^2$ м/с, находим

$$b = \frac{2}{3} \frac{ml}{M} v_\tau N_L^{(норм)} d_s \approx 10^7 \text{ с}^{-1}.$$

Результаты расчетов

На рис. 3 показаны результаты сравнения расчетов коэффициента сопротивления $k_f = \frac{3\pi d \mu}{k_m}$, найденного по формуле Стокса, в которой учтена поправка Каннингема k_m [5] (кривая 1), с коэффициентом сопротивления

$$k_f = \frac{4}{3} m N_L^{(норм)} S_3 v_\tau \left[1 - \left(\frac{d}{2} \right)^3 / \left(\lambda + \frac{d}{2} \right)^3 \right],$$

найденным с использованием модели молекулярных пучков, учитывающей собственный объем частицы (кривая 2). Как видим из сопоставлений, для ультрадисперсных частиц ($d = 10^{-7}$ м) имеется полное совпадение результатов. Неплохое согласование данных имеется и для частиц размером $d = 10^{-5}$ м, то есть в том диапазоне размеров, где кинетическая модель пучков уже не должна работать.

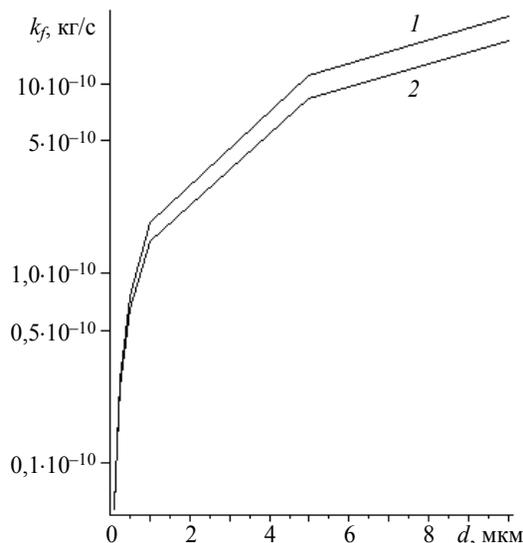


Рис. 3. Зависимость коэффициента сопротивления от диаметра частицы

Для численного решения задачи предложена явно- неявная схема интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений, в которой каждый этап многошаговой технологии Рунге-Кутты заканчивается реализацией неявной части аппроксимирующей схемы [6].

На рис. 4 показаны сравнения результатов вычислений по предложенной вычислительной технологии решения уравнений Эйлера для трубки с аналитическим решением (24). Как видим из рисунка, имеется хорошее согласование даже для случая $\theta(0) = 0,5$ радиан.

Рис. 5 иллюстрирует, что магнитный полюс визуализирующей сферы является центром притяжения для всех трубок, концы которых из-за большого сопротивления в воздухе всегда движутся по геодезическим линиям.

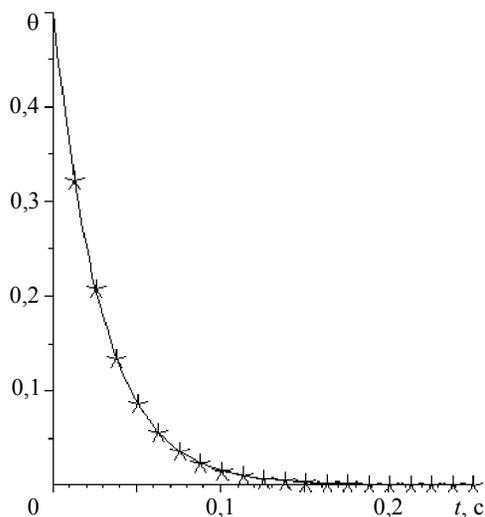


Рис. 4. Сопоставление результатов численного (сплошная кривая) и аналитического (звездочки) решений

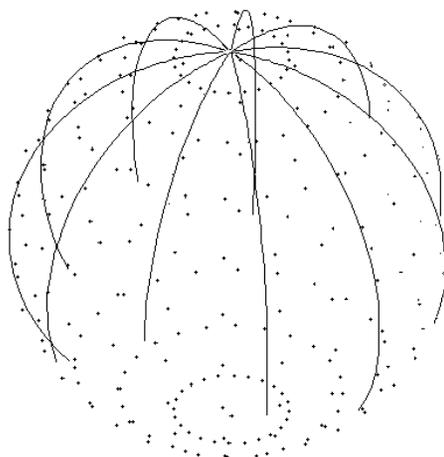


Рис. 5. Визуализирующая сфера с траекториями кончиков нанотрубок, вращающихся вокруг своих центров масс

На рис. 6 показаны кривые выхода трубок на направления внешнего магнитного поля для случаев, когда: 1 – $B = 5 \cdot 10^{-5}$ Тл (уровень напряженности магнитного поля Земли на средней широте); 2 – $B = 10^{-4}$ Тл (в два раза увеличенная величина); 3 – $B = 2 \cdot 10^{-4}$ Тл (в четыре раза большая величина). При заданных геометрических размерах нанотрубок и заданной величине собственного магнитного момента трубок $\mu = 7 \cdot 10^{-19}$ Дж/Тл указанные выше значения B отвечают следующим значениям собственных частот трубок: 1 – $n = 2,65 \cdot 10^4$ с $^{-1}$; 2 – $n = 3,75 \cdot 10^4$ с $^{-1}$; 3 – $n = 5,3 \cdot 10^4$ с $^{-1}$.

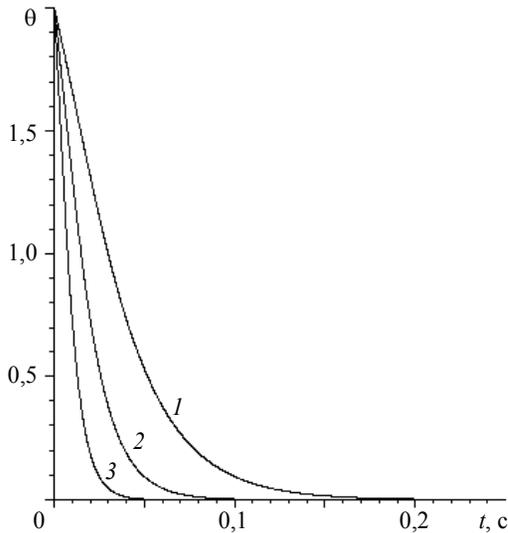


Рис. 6. Характер изменения угла нутации со временем при различных значениях напряженности внешнего магнитного поля

Заключение

В условиях вращения нанотрубок в воздушной среде, характеризуемой нормальным уровнем давления и температур, найденная величина момента сопротивления оказалась существенно выше скорости изменения кинетического момента (момента силы инерции). В результате, в отличие от ситуации в вакууме, в реальности колебания трубок отсутствуют, а их движение является аperiодическим и осуществляется по геодезическим линиям виртуальной визуализирующей сферы. Этот же фактор высокого сопротивления был причиной существенной модификации вычислительной технологии Рунге-Кутта, каждый этап которой теперь обязательно завершался неявным шагом.

ЛИТЕРАТУРА

1. Томилов Е.Д. Теоретическая механика: в 2 ч. Томск : Изд-во ТГУ, 1970. Ч. 2. 317 с.
2. Волькенштейн В.С. Сборник задач по общему курсу физики. М.: Наука, 1976. 464 с.
3. Лойцянский Л.Г., Лурье А.И. Курс теоретической механики. М.: Изд-во ГТЛ, 1955. 520 с.
4. Бубенчиков М.А. Об идеальных колебаниях нанотрубок в естественном магнитном поле // Вестник ТГУ. Математика и механика. 2010. № 2 (10). С. 45–52.
5. Хаппель Дж., Бренер Л. Гидродинамика при малых числах Рейнольдса. М.: Мир, 1976. 464 с.

6. Бубенчиков М.А. Движение ультрадисперсных частиц в закрученной секции кольцевого канала // Вестник ТГУ. Математика и механика. 2010. № 2 (10). С. 38–44.

Статья принята в печать 06.09.2010 г.

Bubenchikov M.A. MOTION OF NANOTUBES IN AN AIR MEDIUM UNDER THE INFLUENCE OF AN ELECTROMAGNETIC FIELD. The dynamics of nanotubes as homogeneous unstrained structures possessing their own magnetic moment due to presence of intercalated iron is described in the paper. The resistance force conditioned by air molecule impact on the concerned particle was determined. An asymptotically exact solution of the problem of nanotube motion in a medium with resistance was constructed. Rotation of a tube around the center of inertia was studied numerically in the case when the initial orientation of the tube does not coincide with the direction of the external magnetic field vector.

Keywords: nanotube, intercalated iron, intrinsic magnetic moment, moment of inertia of a carbonic crystal structure, resistance of tube in a gaseous medium

BUBENCHIKOV Mikhail Alekseevich (Tomsk State University)

E-mail: Michael121@mail.ru