

На правах рукописи

Ковалева Маргарита Алексеевна

НЕСТАЦИОНАРНАЯ ДИНАМИКА СУЩЕСТВЕННО НЕЛИНЕЙНЫХ
МОЛЕКУЛЯРНЫХ И ОСЦИЛЛЯТОРНЫХ ЦЕПЕЙ И МЕТАМАТЕРИАЛОВ

02.00.06— Высокмолекулярные соединения

Автореферат на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Москва — 2020

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки
Федеральном исследовательском центре химической физики им. Н.Н.Семенова Российской
академии наук

Официальные оппоненты:

Люлин Сергей Владимирович

доктор физико-математических наук, член-
корреспондент РАН, Федеральное государственное
бюджетное учреждение науки Институт
высокомолекулярных соединений Российской
академии наук, заведующий лабораторией

Гендельман Олег Валерьевич

доктор физико-математических наук, Технион -
Израильский технологический институт, декан

Ерухимович Игорь Яковлевич

доктор физико-математических наук, профессор,
Федеральное государственное бюджетное учреждение
науки Институт элементоорганических соединений им.
А.Н. Несмеянова Российской академии наук, ведущий
научный сотрудник

Ведущая организация:

Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
Санкт-Петербургский политехнический университет
Петра Великого

Защита состоится « ____ » _____ 2021 г. в _____ часов на заседании
диссертационного совета Д 002.012.01, созданного на базе Федерального государственного
бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра химической
физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук 119991, Москва, Ленинский проспект
38 к 1

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте базе Федерального
государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра
химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук <https://www.chph.ras.ru/>

Автореферат разослан « ____ » _____ 2021 г.

Учёный секретарь диссертационного совета
К.Х.Н.

Т.А.Ладыгина

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследования. В диссертационную работу вошли исследования существенно нелинейных свойств различных полимерных материалов, макромолекул, акустических метаматериалов, полимерных цепей и структур, а также механизмов энергопереноса или локализации энергии в таких системах. Поскольку нелинейные процессы обеспечивают большое количество интересных свойств материалов, их способность к перенаправлению или поглощению энергии, а также, дают возможность управления процессами энергообмена, их изучение является важнейшим аспектом теоретического анализа многих систем.

Акустические метаматериалы являются одним из перспективных направлений развития материаловедения, механики и физики. Упорядоченные метаматериалы могут демонстрировать замечательные свойства, которые могут использоваться для защиты конструкций, сбора, перенаправления и преобразования энергии в природных и техногенных условиях, а также для акустической защиты. Основными особенностями таких материалов является наличие метаструктуры, обеспечивающей заданные акустические свойства. Последние десятилетия акустические метаматериалы привлекают исследователей из различных отраслей науки и технологии. Кроме того, объектами исследования в настоящей работе стали модели полимерных цепей. Рассматривались как кристаллы олигомеров – парафины, так и цепи ДНК, а также модели нанотрубок. Нелинейные свойства таких объектов могут играть роль в важнейших процессах, таких как фазовые и структурные переходы. Кроме того, были исследованы модели автоколебаний, возникающих при межслоевом и поверхностном трении в полимерах и композитах. Изученные процессы влияют на распространение и локализацию энергии и акустических волн. Такие факторы являются важными в эксплуатации и в процессах разрушения материалов.

Цели и задачи исследования. Целью работы является разработка методики для исследования основных закономерностей энергопереноса и локализации энергии, и взаимодействия с внешними полями как в модельных низкоразмерных системах, так и в системах акустических метаматериалов, олигомерах и полимерных структурах.

Для достижения поставленных целей решались следующие задачи:

1. Разработать методы исследования поведения существенно нелинейных систем в условиях резонанса.

2. Проверить применимость методики на низкоразмерных модельных системах.
3. Применить разработанные подходы для существенно нелинейных систем с большим числом степеней свободы, в том числе модели гибкоцепных полимеров. Исследовать нелинейные спектры и возможность локализации энергии и ее переноса.
4. Описать процессы межцепной передачи энергии в моделях гибкоцепных полимеров.
5. Описать процесс коллапсирования и раскрытия нанотрубки на подложке и определить природу явления.
6. Описать процессы распространения колебаний, вызванных трением в слоистых средах и материалах.
7. Исследовать процесс переноса энергии и ее локализации в модели низкоразмерной гранулярной системы на подложке без предварительного сжатия.
8. В модели гранулярного метаматериала с разными степенями предварительного сжатия описать процесс необратимого процесса перенос энергии.

Научная новизна. 1) Разработана методика исследования поведения существенно нелинейных систем в условиях резонанса при помощи полуобратного метода, состоящего в разделении движений на резонансной частоте и медленной эволюции огибающих исходного движения и формализма Предельных Фазовых Траекторий, позволяющих определить максимально возможный энергообмен в системе. Частота самого резонансного движения при этом определяется в рамках исследования медленной эволюции.

2) Проверена применимость методики для модельных существенно нелинейных низкоразмерных систем: системы с одной степенью свободы под действием внешней силы, а также, системы двух и трех частиц с различными типами нелинейности.

3) Разработанные методы исследования применены для существенно нелинейных моделей гибкоцепных макромолекул с большим числом степеней свободы: для одномерной модели макромолекулы и системы нелинейно взаимодействующих цепей с крутильной подвижностью. Исследованы спектры возбуждений таких систем и описаны особенности процессов переноса энергии и ее локализации, а также описаны подвижные локализованные возбуждения.

4) Описаны процессы межцепной передачи возбуждений в моделях олигомеров и в модели ДНК. Предсказаны пороги передачи возбуждения и его локализации.

5) Предсказана природа процесса структурного перехода в нанотрубках на подложке. Показано, что процесс схлопывания и раскрытия нанотрубки описывается локализованным возбуждением. Показана энтропийная природа распространения такого возбуждения, и предсказана его скорость. Полученные данные хорошо согласуются с данными численного молекулярно-динамического эксперимента.

6) Исследован процесс распространения и локализации колебаний, вызванных трением в слоистых и композитных материалах.

7) Исследован процесс переноса и локализации энергии в модели низкоразмерной гранулярной системы на подложке без предсжатия. Предсказаны пороги перехода от переноса энергии к ее локализации. При учете трения найдены условия необратимого переноса энергии.

8) В модели гранулярного кристалла на подложке без предсжатия и со слабым предсжатием и слабым межцепным взаимодействием сформулированы аналитические критерии необратимой передачи энергии между цепями. Найдены условия возможности существования такого режима в зависимости от типа связи между цепями.

9) В модели гранулярного кристалла на подложке найдены условия существования нового типа локализованных возбуждений под действием внешней силы при наличии трения. Найденные возбуждения описаны аналитически и получены численно.

Теоретическая и практическая значимость работы. Теория энергопереноса в метаматериалах и полимерных цепях может быть использована как для разработки конкретных материалов с различными свойствами, так и для понимания механизмов различных фундаментальных процессов в нелинейных средах. Разработанные методы исследования могут быть полезны как для изучения представленных в работе полимерных и композитных систем, так и для широкого круга нелинейных задач в системах нано-, мезо- и макромасштабов. Понимание закономерностей распространения энергии, в том числе передачи и распространения волн в различных полимерных средах и макромолекулярных системах чрезвычайно важно как с теоретической точки зрения, для описания механизмов структурных и фазовых переходов, особенностей распространения звука и тепла, так и с практической точки зрения, для описания и предсказания поведения

макромолекулярных сред и систем, а также их использования для конкретных применений. Понимание механизмов управления процессом передачи энергии может позволить прогнозировать и проектировать различные акустические свойства сред и материалов, и конструировать энергетические накопители или поглотители. Описание механизма передачи энергии в нелинейных средах более общего вида делает полезными полученные результаты для широкого круга задач современной физики, механики и материаловедения, особенно для физики и механики полимеров, композиционных материалов и макромолекулярных наноструктур.

Методы исследования. Теоретические результаты получены как на основе классических методов исследования существенно-нелинейных дискретных и континуальных моделей, так и при помощи разработанных автором методов исследования существенно нелинейных дискретных моделей. Численные результаты получены методами прямого численного моделирования и молекулярно-динамических расчетов

Степень достоверности полученных результатов. Достоверность полученных результатов и обоснованность выводов работы обеспечена использованием теоретически обоснованных и практически проверенных методов, полученные результаты и сделанные выводы не противоречат основным научным концепциям, принятым в научном сообществе. Новые подходы, уточняющие существующие теоретические модели, опубликованы в рецензируемых изданиях, доложены на научных конференциях и приняты научным сообществом.

Положения, выносимые на защиту:

1. Оригинальные методы исследования поведения существенно нелинейных систем в условиях резонанса при помощи полуобратной асимптотической процедуры и выделения разных масштабов эволюции, а также, формализма Предельных Фазовых Траекторий, позволяющие определить особенности как стационарной динамики, так существенно нелинейных процессов, включая интенсивный энергоперенос.
2. Применимость методики апробирована на низкоразмерных модельных системах с различными типами нелинейности, как под действием внешней силы, так и без внешних полей.
3. Разработанные подходы позволили исследовать нелинейные спектры и процессы энергообмена и локализации энергии для существенно нелинейных систем с большим числом степеней свободы, в том числе моделей гибкоцепных полимеров.

4. Описаны процессы межцепной передачи энергии в моделях гибкоцепных полимеров.
5. Теоретически описан процесс коллапсирования и раскрытия нанотрубки на подложке в зависимости от температуры. Показано, что этот процесс локализован в узкой области нанотрубки и может быть описан локализованной нелинейной волной. Выявлен энтропийный характер явления и предсказана скорость его распространения.
6. Описана низкоразмерная гранулярная система без предварительного сжатия. Определены пороги переноса энергии и ее локализации в зависимости от параметров системы. При учете трения получены условия однонаправленного энергопереноса.
7. В модели гранулярного метаматериала с разными степенями предсжатия описаны процессы энергообмена и локализации энергии между отдельными цепями, определен порог локализации энергии. Найдены критерии существования процесса необратимого переноса энергии.
8. Для модели гранулярного метаматериала на подложке под действием внешней силы найдены условия возникновения нового типа локализованных волн и описаны механизмы их возникновения.
9. Для низкоразмерной автоколебательной модели трения слоев в материалах и композитах получено аналитическое описание возможности устойчивого режима обмена энергией или ее локализации. С использованием результатов исследования низкоразмерной системы для протяженной модели показано влияние различных факторов на распространение автоколебательных волновых фронтов и формирование локализованных возбуждений.

Апробация работы. Основные результаты диссертации докладывались и обсуждались на 9-м Международном симпозиуме «Молекулярный Порядок и Подвижность в Полимерных Системах ММОПС» (Санкт-Петербург, Россия 2017), 1-й Международной Нелинейно-динамической конференции NodyCon 2019 (Рим, Италия, 2019г.), международной конференции «Нелинейная Динамика Сложных Систем» в рамках Международного симпозиума «Основные задачи волновой физики (NWP2014)» (Нижний Новгород, 2014), 8-й и 9-й Международной Нелинейно-динамической конференции ENOC (Вена, Австрия, 2014г., Будапешт, Венгрия, 2017г.), Коллоквиуме Euromech 580 «Существенно-Нелинейная Динамика и Акустика Гранулярных Метаматериалов» (Гренобль, Франция, 2016г.), 27м Белфер симпозиуме «Нелинейные волновые явления» (Хайфа, Израиль, 2014г.), 14-й, 15-й

Международных конференциях «Динамические системы: теория и приложения DSTA» (Лодзь, Польша, 2017, 2019 гг.), 4-й Международной конференции по вибро-ударным системам и системам с контактом и трением ICoVIS2018 (Кассель, Германия, 2018 г.), на XLIV, XLV, XLVI, XLVII и XLVIII Международных конференциях «Актуальные Проблемы Механики (APM)» (Санкт-Петербург, Россия, 2016, 2017, 2018, 2019, 2020 гг.), Международной конференции «Дни Дифракции» (Санкт-Петербург, 2018 г.), 10-й Всероссийской конференции «Нелинейные колебания механических систем им. Ю.И. Неймарка», (Нижний Новгород, 2016 г.), 8-й всероссийской Каргинской конференции «Полимеры в стратегии научно-технического развития РФ «Полимеры — 2020»» (Москва, 2020 г.), Конференции «Графен и двумерные материалы GrapheneCanada 2020» (Канада, 2020 г.), VI научной молодежной школы-конференции «Химия, физика, биология: пути интеграции» (Москва, Россия, 2018 г.), ежегодных научных конференциях отдела полимеров и композиционных материалов ФИЦ ХФ РАН (ИХФ РАН) (г. Москва, Россия 2015–2020).

Публикации. По материалам диссертации опубликованы 11 статей в рецензируемых журналах, входящих в перечень ВАК и одна глава в монографии, а также 24 тезиса в сборниках конференций. Список основных работ приведен в конце диссертации.

Личный вклад автора. Автор самостоятельно определил направление исследования, сформулировал основные задачи работы, провел анализ литературных источников, обобщил полученные численные и аналитические результаты. Представленные в работе численные результаты были получены автором лично и совместно с сотрудниками лаборатории физики и механики полимеров, а также коллегами из других научных центров. Аналитические результаты были получены лично автором.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, пяти глав, двух приложений, формулировки выводов, списка сокращений, списка публикаций автора и списка цитируемой литературы. Работа изложена на 294 страницах и содержит 101 рисунок, 3 таблицы и библиографию из 386 наименований.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность темы диссертации, определены цели и задачи работы, представлены методы исследования. Кратко изложены основные результаты исследования, приведены научная новизна и основные положения, выносимые на защиту.

В первой главе рассматриваются современные представления о роли нелинейных процессов и локализованных волн в динамике полимерных и биологических макромолекул и материалов. Подчеркивается, что именно нелинейность играет ключевую роль в фазовых и структурных переходах, происходящих посредством распространения локализованных фронтов, представляющих собой локализованные волны. Примером реализации такого сценария является процесс полимеризации диацетиленов. При этом, поскольку состояния с двух сторон от фронта не являются эквивалентными по энергии, избыток энергии, освобождающейся при переходе может приводить к колебаниям за фронтом волны. Процессы распространения локализованных фронтов, связанных со структурными и фазовыми переходами рассмотрены в работах О.В.Гендельмана, Л.И. Маневича, А.В. Савина, В.В.Смирнова и др.

Зарождение переходных процессов, не связанных с движением фронтов, также очень часто основано на возникновении уединенных локализованных возбуждений, связанных с локальными перестройками в среде. Примером может служить зарождение фазовых перестроек в кристаллах полиэтилена под действием сдвиговых деформаций. Локализованные возбуждения также исследуют на протяжении многих лет в связи с явлением локального раскрытия двухцепной молекулы ДНК. Существуют различные модели, описывающие такие локализованные переходы. Одна из распространенных моделей, введенная Л.В. Якушевич, рассматривает крутильную динамику цепей ДНК. Упомянутая модель является нелинейной и в ней могут существовать локализованные волны.

Помимо фазовых и структурных переходов, локализованные возбуждения могут существенным образом влиять на распространение в средах и материалах, и, в частности, влиять на теплопроводность различных сред. Важной особенностью полимерных кристаллов является наличие структуры в виде квази-одномерных протяженных молекул со слабым взаимодействием соседних цепей. В таком случае одним из важнейших аспектов исследования энергопереноса оказывается существование и распространение локализованных возбуждений вдоль макромолекулярных цепей. В ряде работ, например, А.В.Савина, было показано, что наличие пространственно-локализованных волн препятствует распространению фононов вдоль цепей полимеров.

В силу значительной роли нелинейных волн и пространственно-локализованных возбуждений в современной физике, включая физику полимеров, таким волнам посвящено большое количество исследований в последние десятилетия. Изучение нелинейных возбуждений проводится как

численно, так и теоретически, в различных системах. Исследованию данного вопроса для различных макромолекулярных и полимерных моделей посвящены работы Г. Гаета, О.В. Гендельмана, С.В. Дмитриева, Е.А. Зубовой, Н.А. Ковалевой, Е.А. Корзниковой, Л.И. Маневича, Ю.А. Косевича, А.В. Савина, В.В. Смирнова, И.А. Стрельникова, М.А. Фахреддинова, Л.В. Якушевич и др. Исходно понятие локализованных волн (солитонов) было введено для бесконечных континуальных моделей, впоследствии теория была расширена на случай бесконечных дискретных систем. Были также введены локализованные волны с внутренними степенями свободы (бризеры).

Поскольку в реальных полимерных цепях может быть важна дискретность структуры, то представляет особенный интерес возможность описания пространственно-локализованных волн в дискретных системах. Впервые в дискретных цепях солитоны наблюдались в цепочке нелинейных осцилляторов Ферми-Паста-Улама (ФПУ). В пределе длинных волн локализованные волны могут быть описаны в рамках континуального уравнения Кортевега де Вриза. В пределе коротких длин волн, локализованные возбуждения (бризеры) могут быть описаны в континуальном пределе нелинейным уравнением Шредингера. В дискретных системах существует дополнительный класс локализованных возбуждений, которые называют дискретными бризерами. Они локализованы в очень узкой пространственной области и не могут быть описаны в рамках континуальных подходов.

Самая простая но существенно цепная модель описывает крутильные движения связанных элементов — это модель цепи маятников на одинаковых подвесах, предложенная Скоттом. Поскольку такая модель является простым и наглядным механическим аналогом для разных, в том числе микро- и наномасштабных физических систем, она приобрела большую популярность в теоретических исследованиях. Модель Скотта послужила, например, первой моделью крутильной динамики ДНК. Впоследствии были разработаны ее модификации, позволявшие лучше описать те или иные физические объекты.

Система нелинейно связанных маятников является адекватной качественной физической моделью для таких систем как кристаллы парафинов, ферромагнитные цепи, органические молекулы, включая ДНК. Ранее проводились исследования для движения таких систем с некоторыми упрощениями. Преимущественно, сложность описания нелинейной динамики таких существенно-нелинейных цепей связана с необходимостью делать предположения о малости нелинейности или амплитуды динамики для анализа. Однако, во многих физических приложениях такие предположения не являются

обоснованными, поскольку амплитуды и нелинейность в таких цепях могут быть существенными. В связи с этим, для анализа существенно нелинейной динамики цепей маятников и аналогичных им моделей крутильной динамики автор настоящей работы прибегает к разработанному полуобратному методу анализа существенно нелинейных систем.

Нестационарные резонансные процессы являются неотъемлемой частью многих физических (и не только) явлений, связанных с переносом энергии и энергообменом. Однако, многие общие черты не рассматривались в таких процессах из-за распространенного мнения, что все нестационарные процессы можно представить как комбинацию стационарных колебаний и волн. Действительно, в линейной теории, согласно принципу суперпозиции, любой динамический процесс можно представить как сумму нормальных колебаний или нормальных мод. Такое представление будет приближенно справедливым и в нелинейном случае в отсутствии межмодового резонанса. Таким образом, обычным инструментом для изучения стационарных и нестационарных нелинейных процессов, анализ их устойчивости и бифуркаций, был связан с понятием нелинейных нормальных мод. В таком случае, существенно нелинейные локализованные моды возникают в результате бифуркаций ННМ и приводят к существенному нарушению симметрии динамики и к нелинейной локализации энергии (стационарной локализации). Механизм формирования локализованных ННМ напрямую связан с существованием асимметрии в результате влияния нелинейности при внутреннем резонансе. Хорошо известно, что пространственно-локализованные возбуждения важны в различных областях нелинейной физики и определяют элементарные механизмы для многих физических процессов. Показательными являются примеры локализованных мод, наблюдаемые в полимерных молекулах и кристаллах

При описании нелинейных возбуждений и переноса энергии в нелинейных цепях в нестационарном случае часто плодотворным оказывается описание на основе предельных фазовых траекторий (ПФТ). Это понятие введено Л.И. Маневичем, и соответствует особому режиму, который проявляется в максимально возможном обмене энергией между двумя связанными полями или частицами. Процессы энергообмена и энергопереноса имеют основополагающее значение не только для многих физических явлений, но и для многочисленных приложений. Например, конструкция амортизаторов может основываться на особенностях поглощающего материала и/или на нелинейных свойствах и характеристиках, как связей между элементами, так и собственных. Понимание резонансного режима энергообмена, описываемого

при помощи методологии ПФТ, помогает выявить критерии локализации энергии и энергетического обмена во многих системах, в том числе системы с нелинейными поглотителями энергии. Одним из ярких примеров приложения нелинейного анализа к изучению распространения возбуждений и их поглощения является исследование акустических метаматериалов.

Метаматериалы – это широкий класс структур и сред, которые привлекают внимание исследователей из различных областей науки и техники в течение последних двух десятилетий. Главной особенностью метаматериалов является наличие упорядоченной или неупорядоченной структуры внутри материала, называемого, или метаструктуры, которая имеет больший масштаб, чем молекулярный или атомный. Новый пространственный масштаб делает длину волны сигналов или возбуждений с более низким частотным диапазоном сопоставимой с масштабом внутренней искусственно образованной структуры. Это свойство становится причиной большого количества новых эффектов и макроскопических свойств материала. Тем не менее, существование сверхструктуры в среде влияет также на свойства, связанные с длинами волн гораздо большими, чем типичный масштаб метаструктуры

Первые метаматериалы были исследованы в оптике, когда фотонные кристаллы были предложены в качестве модели при распространения света в периодической структуре с разными показателями преломления. Позже идея была заимствована для материалов с периодически изменяемыми механическими свойствами, которые влияют на акустические волны, упругие волны и передачу энергии. В таких системах были получены многообещающие результаты для гранулярных кристаллов и композитов, пористых сред и слоистых композитов. Есть многочисленные работы по разработке и исследованию полосы непропускания, изменения скорости распространения волн, появляющиеся в таких материалах и системах. Они получили общее название акустические метаматериалы (АММ).

Одним из самых интересных видов АММ стали гранулярные АММ. Такие материалы состоят из твердых упругих частиц, уложенных в некотором порядке на подложку или в матрицу. При этом поведение существенно зависит как от свойств матрицы или подложки, так и от формы и свойств, а также размеров жестких частиц. Одна из основных причин такого интереса к гранулярным АММ заключается в возможности качественного изменения их динамических свойств, которые в действительности могут варьироваться от слабо нелинейных и гладких (когда эти среды сильно предварительно сжаты)

до сильно нелинейных и негладких (при слабом или отсутствующем предварительном сжатии).

Одним из основных направлений исследования АММ является виброзащита и защита от ударов. В качестве одного из способов защиты от внешних воздействий, для которого используются гранулярные системы, заключаются в том, что защита/изоляция осуществляется путем захвата/удержания энергии удара в определенной пространственной области. Такие гранулярные системы, разработанные для защиты от ударов называются гранулярными волновыми контейнерами или гранулярными протекторами. Еще одним из возможных применений акустических метаматериалов являются настраиваемые вибрационные фильтры и акустические выключатели и выпрямители.

Уединенные волны обеспечивают основной (но не единственный) механизм распространения возмущений в однородных гранулярных цепях. Поэтому при исследовании явлений энергопереноса часто обращаются именно к локализованным волнам. Для гранулярных цепей описаны локализованные волны как в континуальном пределе, так и для дискретного случая. Изучению локализованных и нелинейных волн в гранулярных метаматериалах посвящены работы А. Вакакиса, Г. Джеймса, К. Дарайо, Ю. Старосветского и др.

В последнее время возник большой интерес к расширению исследований от одномерных цепей к многомерным гранулированным средам. Одно из обобщений — это дискретные однородные гранулярные цепочки, взаимодействующие через слабые связи. Такие цепи представляют собой значительную редукцию по сравнению с двумерными цепями, в то же время позволяют использовать существующие исследования для одномерных цепей.

Для распространения нелинейных возбуждений в различных средах важную роль играет наличие трения и рассеяния энергии. Именно наличие трения позволяет обеспечить однонаправленность переноса энергии в однородных системах.

Кроме рассеяния энергии, трение может быть источником возникновения колебаний и волн. Автоколебания регистрируются экспериментально при взаимодействии различных поверхностей и контактирующих материалов. При этом между трущимися слоями могут возникать автоколебания, которые служат источником акустических волн (звука), и играют большую роль в поведении взаимодействующих тел, в том числе при изнашивании и разрушении. Несмотря на то, что существует огромное количество работ, посвященных эволюции трущихся поверхностей, не существует общего подхода для описания этого процесса. Есть ряд подходов, основанных на

описании движений и взаимодействий на мезоскопическом уровне. Однако, невозможно разработать универсальную модель, предсказывающую влияние трения на движение и эволюцию материала, поскольку трение очень чувствительно даже к малым изменениям таких факторов как влажность, температура, состав трущихся поверхностей, наличие наполнителей и смазки. Для описания процессов, происходящих при трении, часто используется обобщенная модель, которая не учитывает конкретные геометрические и физические свойства, например, преобразование части энергии в тепловую или частичное разрушение поверхностей. Однако, мезоскопический подход, описывающий эволюцию и взаимодействие отдельных частиц материала или наполнителя, может существенно прояснить влияние трения на появление различных структур и волн, которые могут быть источником звука, деформации и передачи энергии в материалах. В таком случае взаимодействие двух трущихся поверхностей может рассматриваться как взаимодействие частиц цепи упруго связанных элементов с трущейся упругой подложкой при этом трение описывается некоторым законом. Такой подход позволяет описывать многочисленные коллективные явления, обусловленные трением, например, появление колебаний и волн в системах с прерывистым скольжением. Теоретическому исследованию волн, вызванных трением, посвящены работы Я. Аврейцевича, О.В. Гендельмана, Р. Ибрагима, А. Папанжело, В.Н. Пилипчука и др.

Как мезоскопический, так и макроскопический подходы требуют наличия некоторого закона трения, как правило, эмпирического или феноменологического, который описывает зависимость силы трения от относительной скорости движения. Существует много видов такой зависимости, используемой в расчетах. Типичная зависимость силы от скорости для сухого трения имеет разрыв характеристики в точке, соответствующей нулевой скорости, которая соответствует идеализированной фазе остановки в прерывистом скольжении. Однако, во многих случаях, при неидеально сухом трении эта фаза заменяется на очень медленное скольжение, которое описывается быстро возрастающей силой в окрестности нуля скорости. Именно такой вид зависимости рассмотрен в настоящей работе.

Исследование распространения колебаний, вызванных трением часто проводят на дискретных моделях, представляющих собой автоколебательные элементы, свойства которых обусловлены законом трения. В таких моделях в зависимости от начальных условий могут возникать различные локализованные состояния с периодическими и нерегулярными колебаниями в режиме

прерывистого скольжения. Кроме того, возможно появление параметрической области, где такие колебания начинают двигаться вдоль по цепочке. Такие распространяющиеся колебания описаны как для эмпирической системы, описывающей трение в конкретной системе, так и для более общей модели, не связанной с трением, но демонстрирующей автоколебания. В настоящей работе проведено обобщение результатов для автоколебательной системы, свойства которой описываются законом трения.

Во второй главе проводится апробация полуобратного метода анализа динамики для низкоразмерных существенно нелинейных систем. Поскольку полуобратный метод в дальнейшем применяется для моделей крутильной подвижности макромолекул, то основными объектами для апробации разработанного подхода явились простые объекты с крутильными степенями свободы: маятник, два и три нелинейно связанных маятника, нелинейность связи маятников (косинусная) характерна для крутильных взаимодействий. При этом рассматриваются процессы обмена энергией с внешним полем и передачи энергии между элементами короткой нелинейной цепи.

Для этого сначала рассматривается существенно-нелинейный осциллятор с крутильной степенью свободы, то есть маятник под действием внешней параметрической силы. В такой системе возможен резкий скачок амплитуды колебаний маятника при прохождении частоты силы через некоторое пороговое значение. Такое явление называется параметрическим резонансом и изучено в пределе слабой нелинейности. В частности, предсказаны границы резонанса. Однако, для больших амплитуд движения маятника слабонелинейное (квазилинейное) приближение неприменимо. Для такого случая в работе предложен полуобратный метод, суть которого состоит в выделении некоторой резонансной частоты поведения системы, которая существенно зависит от амплитуды. Движение на этой частоте отделяется от движения на других, более медленных масштабах времени, которые отвечают за эволюцию огибающих исходного быстрого колебательного процесса. Такое разделение масштабов используется с применением многомасштабного разложения в окрестности резонанса. Выделенная медленная эволюция огибающих позволяет анализировать как поведение в стационарных состояниях системы, так и нестационарную динамику.

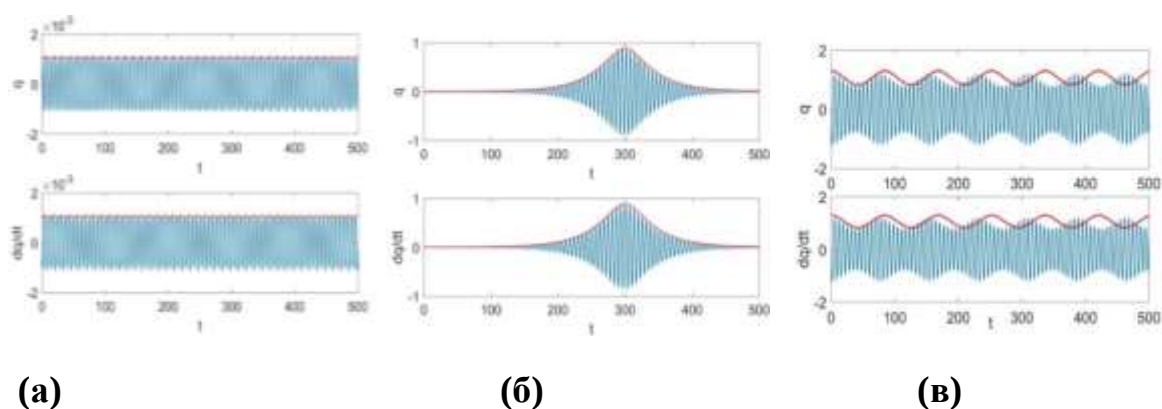
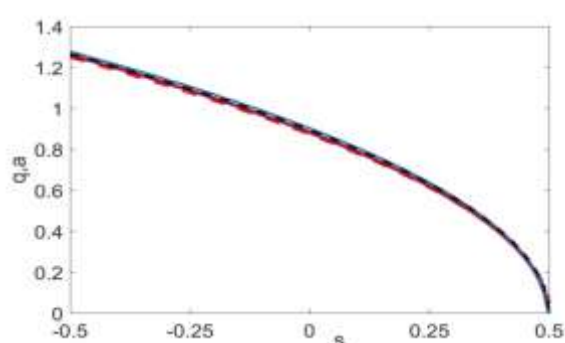


Рис. 1. Сравнение эволюции исходного маятника с параметрическим воздействием и асимптотической системы, показывающей эволюцию огибающих при начальных условиях, близких к нулю. а) частота поля ниже резонансной области, б) частота поля в резонансной области в) частота поля выше резонансной области.

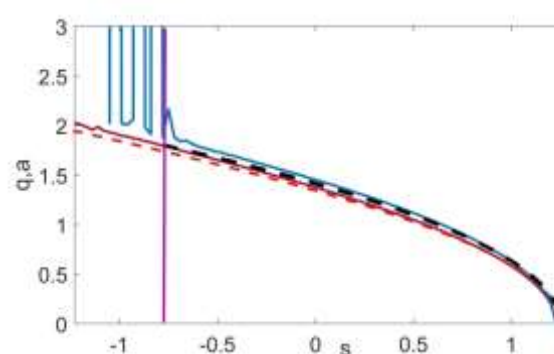
Для маятника под действием параметрической силы такое исследование позволяет найти механизм появления параметрического резонанса. Анализ фазовой плоскости системы, описывающей огибающие в медленном масштабе времени позволяет говорить о рождении и преобразовании стационарных режимов системы. Стационарные режимы и ПФТ, связанные с ними, определяют существование резонанса. На рис.1 представлено сравнение эволюции исходной системы при частотах ниже резонансной области, в области резонанса и при частотах выше резонансной области. На рис.2 представлены численно наблюдаемые и предсказываемые асимптотически амплитуды маятника в случае малых и больших амплитуд внешней силы. Для малых амплитуд силы одинаково хорошо работает как предсказание, полученное при помощи полуобратного метода, так и при помощи квазилинейного подхода. В случае больших амплитуд силы квазилинейный подход становится неприменимым начиная с некоторых амплитуд отклика.

Дальнейшее усложнение объекта исследования подразумевает увеличение числа степеней свободы. В работе исследованы процессы энергообмена и локализации энергии в системе двух нелинейно связанных маятников. Применение полуобратного метода исследования здесь аналогично предыдущему случаю и связано с исходным выделением резонансного поведения на некоторой частоте, которая сначала неизвестна. После отделения быстрого резонансного движения от медленной эволюции огибающих, получаются уравнения, позволяющие существенно редуцировать размерность системы и описать как стационарную, так и нестационарную динамику в медленном масштабе времени. Анализ стационарных режимов (так

называемых, нелинейных нормальных мод, ННМ) в редуцированной системе позволяет найти зависимость их частот от амплитуды и подтверждает предположение о наличии резонансного движения на частоте ННМ. Кроме того, зависимость частот ННМ от амплитуды хорошо соответствует численно полученным значениям для широкого диапазона амплитуд. Еще одна особенность найденных стационарных режимов – инверсия спектра. Исходно стационарный режим с наименьшей частотой при увеличении амплитуды колебаний становится режимом с наибольшей частотой. Такое качественное изменение спектра подчеркивается впервые.



(а)



(б)

Рис.2. Амплитуда отклика в зависимости от расстройки параметрической силы (разности частоты силы и частоты основного резонанса) s для начальных условий близких к нулю для полной системы (бордовая линия), системы в слабонелинейном приближении, с соответствующим набором параметров (синяя линия), аналитически полученной амплитуды ПФТ из редуцированной слабонелинейной модели (черная штриховая линия), и амплитуда ПФТ из редуцированной существенно нелинейной модели (красная штриховая линия): а) малые амплитуды силы б) большие амплитуды силы.

Выделение медленного масштаба времени позволяет выявить новый интеграл движения (норму или, другими словами, интеграл чисел заполнения), что облегчает исследование системы. Таким образом удастся редуцировать размерность системы и исследовать ее эволюцию на фазовой плоскости.

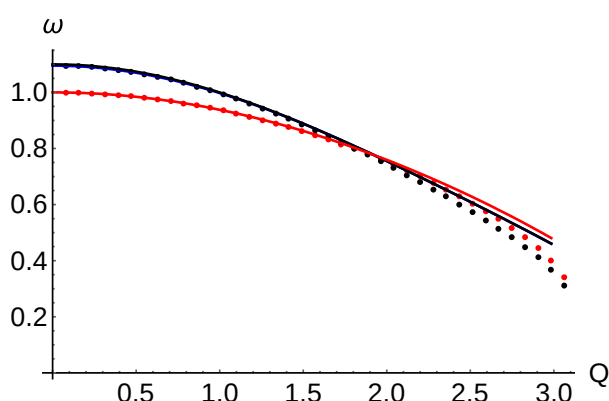


Рис.3. Сравнение аналитического решения с численными результатами для частот синфазного (движение в одну сторону – красный цвет) и антифазного (движение навстречу – черный цвет) режимов для двух нелинейно связанных маятников. Сплошные кривые соответствуют аналитическим решениям; точки – результаты численного моделирования.

Рассмотрение на фазовой плоскости позволяет рассмотреть эволюцию не только стационарных режимов, но и процессов энергообмена. Эволюция ПФТ на фазовой плоскости дает возможность предсказать аналитически переход от интенсивного энергообмена к локализации энергии на одном из маятников в зависимости от связи и уровня возбуждения в системе. При этом полученные аналитически пороговые значения параметров согласуются с данными численного анализа фазового пространства исходной системы двух нелинейно связанных маятников.

Дальнейшее увеличение числа степеней свободы в коротких цепях приводит к рассмотрению цепи из трех связанных колебательных элементов. В работе проанализирована роль типа нелинейности в процессе энергопереноса между концами цепи. Отмечено, что при «жестком» типе нелинейности (т.е. при увеличении частоты колебаний с увеличением амплитуды) переход от локализации энергии на одном из элементов к интенсивной энергопередаче при увеличении параметра связи или энергии возбуждения системы происходит поэтапно: сначала происходит переход к состоянию интенсивного энергообмена между двумя элементами из трех, в то время как третий элемент почти покоится. При дальнейшем изменении параметров, третий элемент тоже возбуждается, но энергообмен становится нерегулярным.

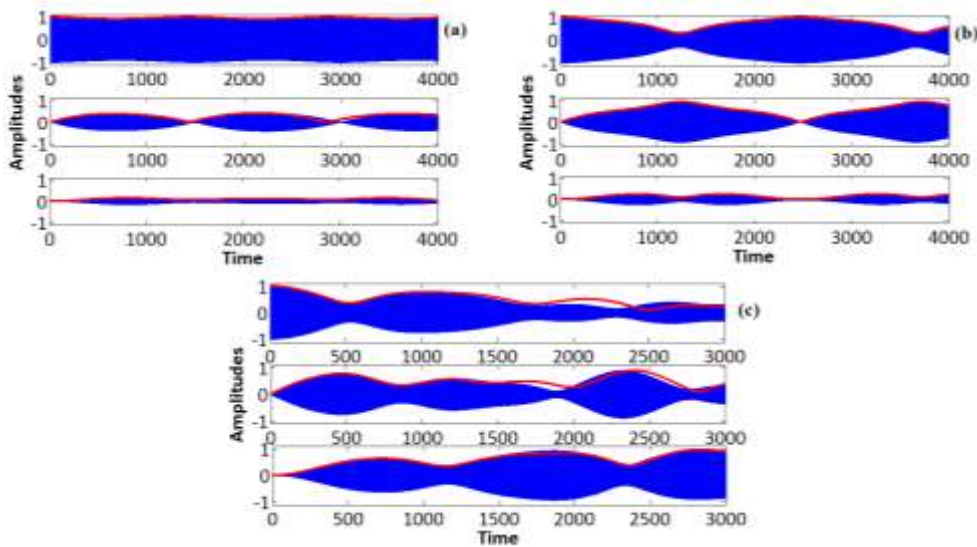


Рис. 4. Эволюция во времени трех осцилляторов с «жестким» типом нелинейности: переход от а) локализации на одном элементе к б) энергообмену между двумя элементами и к в) нерегулярному энергообмену между всеми элементами цепи при последовательном увеличении параметра связи.

Для «мягкого» типа нелинейности (т.е. с уменьшением частоты колебаний при росте амплитуды) переход от локализации энергии к энергообмену происходит пороговым образом и зависит от амплитуды возбуждения и параметра связи. Поскольку крутильные колебания в цепи из трех маятников обладают свойствами нелинейности «мягкого» типа, то можно найти пороговые значения параметров для перехода от локализации энергии на одном краю короткой цепи к переносу энергии между ее концами.

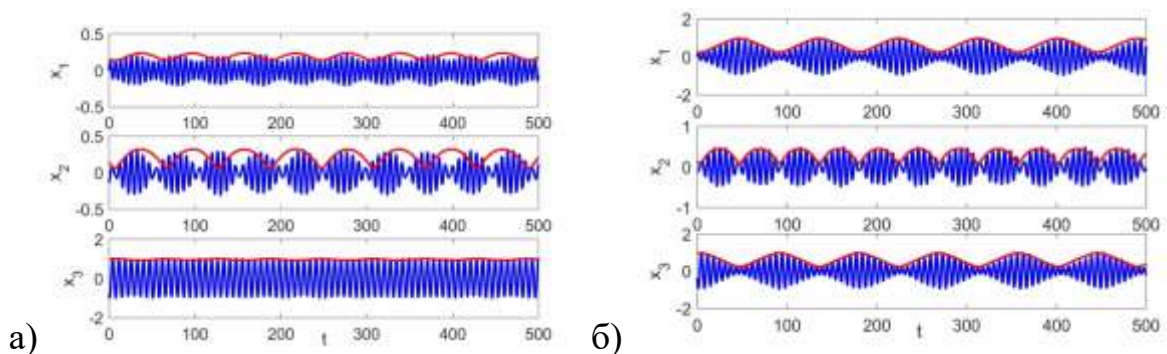


Рис.5. Эволюция во времени трех осцилляторов с «мягким» типом нелинейности: переход от а) локализации на одном элементе к б) регулярному энергообмену между всеми элементами цепи при последовательном увеличении параметра связи.

При помощи полуобратного метода исследования, аналогично системе двух связанных маятников, удастся описать медленную эволюцию огибающих исходных колебаний. Это позволяет найти частоты стационарных режимов, и

исследовать переход от локализации энергии к интенсивному переносу энергии. В работе показано, что этот переход не связан с эволюцией ни одного из стационарных режимов системы при изменении параметров системы, а определяется эволюцией ПФТ. Наличие нового интеграла движения, аналогичного полученному для системы двух маятников (нормы или интеграла чисел заполнения), позволяет исследовать эволюцию ПФТ. Оказывается, что переход от локализации энергии к интенсивному энергообмену между концами короткой цепи происходит при прохождении ПФТ и стационарных режимов через хаотическую область фазового пространства. При этом сценарии перехода к хаосу проиллюстрированы изменениями спектров стационарных режимов.

Таким образом, во второй главе проведена апробация полуобратного метода исследования существенно нелинейных систем на низкоразмерных системах, в том числе систем с крутильной подвижностью и найдены особенности спектров, связанные с нелинейностью коротких цепей. Кроме того, изучены особенности распространения энергии для систем с различным типом нелинейности.

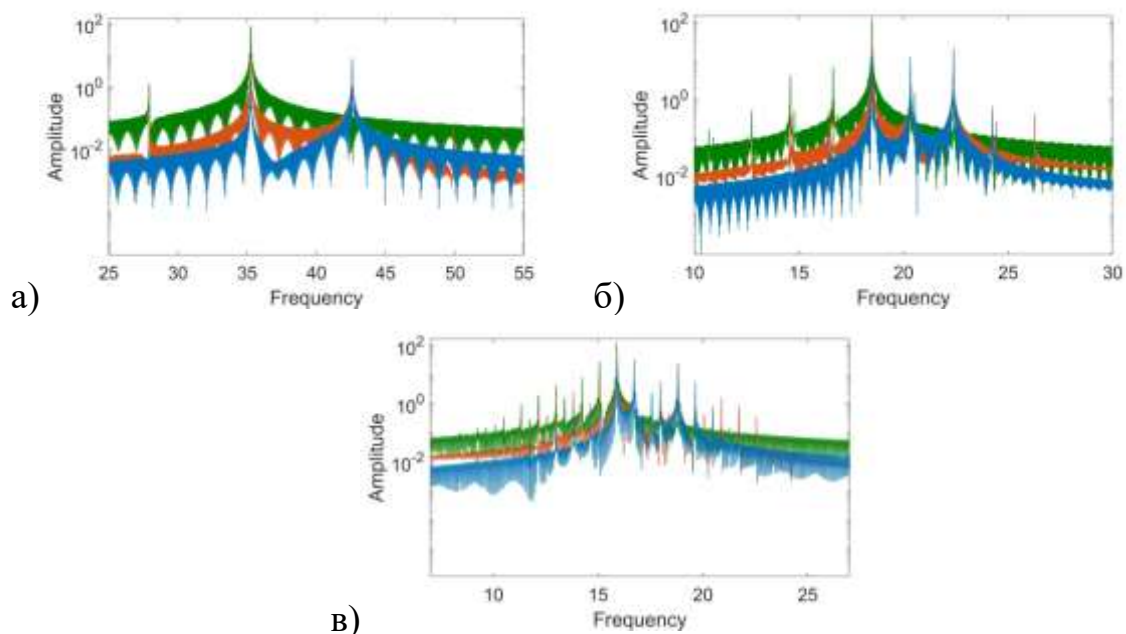


Рис. 6. Спектр (быстрое преобразование Фурье) стационарного режима с локализацией энергии на крайнем элементе в системе трех нелинейно связанных маятников при последовательном увеличении параметра связи. При приближении к хаотической области возрастает число присутствующих в спектре частот. Зелёный цвет, верхняя кривая обозначает первый элемент, оранжевый цвет, средняя кривая обозначает второй элемент, синий цвет, нижняя кривая обозначает третий элемент короткой цепи.

В третьей главе представлены результаты исследования моделей макромолекулярных и полимерных систем. Сначала исследована стационарная и нестационарная динамика крутильной подвижности моделей гибкоцепных полимеров и олигомеров, включая модели парафинов, полиэтилена. Затем исследовано межцепное взаимодействие двухцепной модели ДНК. В конце главы рассмотрена цепочечная модель эволюции нанотрубки на подложке и определены качественные механизмы процесса ее коллапсирования и раскрытия.

Поскольку многие гибкоцепные полимеры образуют структуры, в которых связи вдоль каждой из макромолекулярных цепей намного больше, чем связи между соседними цепями, то многие процессы в полимерных материалах можно описать при помощи модели одной цепи, без рассмотрения динамики соседей. При этом, большая часть таких полимерных цепей демонстрирует крутильную подвижность, которая служит источником многих особенностей полимерных сред и явлений в ней. Так, дефекты, зарождение новых фазовых состояний и функциональные процессы в полимерных кристаллах и молекулах зачастую связаны с крутильными степенями свободы. Поэтому в современной физике полимеров большое внимание уделяется именно моделям крутильной динамики макромолекул. Одной из таких моделей является модель синус-решетки, или нелинейно связанных маятников.

$$\frac{d^2 \varphi_j}{dt^2} - \beta (\sin(\varphi_{j+1} - \varphi_j) + \sin(\varphi_j - \varphi_{j-1})) + \sigma \sin \varphi_j = 0$$

Для анализа стационарной и нестационарной крутильной динамики модели гибкоцепных макромолекул (синус-решетки), используется разработанный и апробированный на низкоразмерных моделях полуобратный метод исследования. Аналогично исследованиям коротких цепей, с использованием предположения о резонансном движении на некоторой частоте, выделена медленная эволюция огибающих. При этом, как и для коротких цепей, получен спектр стационарных нелинейных режимов в зависимости от амплитуды динамики.

$$\omega^2 = \frac{2}{Q} \cdot 2J_1 \cdot 2Q \left(\sin \frac{\kappa}{2} \right)^2 + \sigma J_1 Q,$$

Q - амплитуда колебаний. При этом частоты для простейших режимов (синфазные и антифазные), допускающих точное решение, хорошо соответствуют решениям, полученным в результате асимптотического анализа. Полученные данные также можно сравнить с известными результатами для спектра линейной цепи в периодическом потенциале (модели Френкеля-Конторовой). На рис. 7 показано, что дисперсионные соотношения при малых

амплитудах соответствуют дисперсионным кривым линейной цепочки Френкеля-Конторовой, однако при больших амплитудах, т.е. при существенном влиянии нелинейности отличия становятся существенными: частота антифазного режима (противоположно-направленное движение соседей) стремится к нулю и пропадает при больших амплитудах, появляются запретные зоны в спектре.

Помимо стационарных режимов, получены режимы нестационарного переноса энергии локализованными волнами с внутренней колебательной степенью свободы (бризерами). Такие волны описаны для произвольных амплитуд в существенно нелинейном случае.

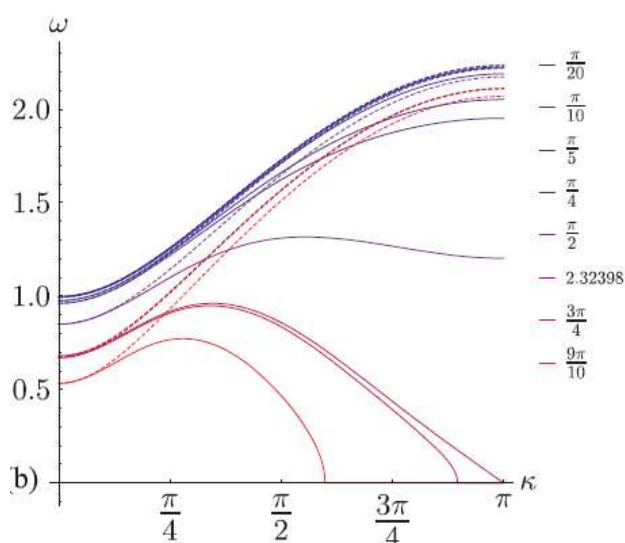


Рис. 7. Дисперсионные соотношения для синус-решетки при различных амплитудах колебаний (значения амплитуд отображаются справа от рисунка). Штриховые линии обозначают кривые, соответствующие модели Френкеля-Конторовой с аналогичными параметрами.

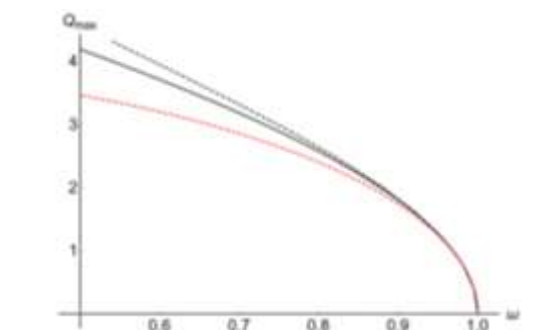


Рис.8 Амплитуда бризера в зависимости от его частоты. Сплошная линия показывает точное значение для решения уравнения $\sin$ -Гордона, черные и красные пунктирные кривые соответствуют полученному в работе асимптотическому уравнению и малоамплитудному его приближению.

$$\frac{\beta}{2\omega} \varphi_x^2 + \frac{\omega(\beta - v_a^2 + 2v_a v_p)}{2\beta} \varphi^2 + (\varphi \delta^2 - \varphi_{xx}) + \sigma J_0 \left(\sqrt{\frac{2}{\omega}} \varphi \right) = \sigma,$$

где v_a и v_p амплитудная и фазовая скорости, φ - амплитуда, δ - фаза.

Полученные решения хорошо согласуются с известным решением уравнения син-Гордона, появляющегося в континуальном (длинноволновом) пределе уравнения Френкеля-Конторовой.

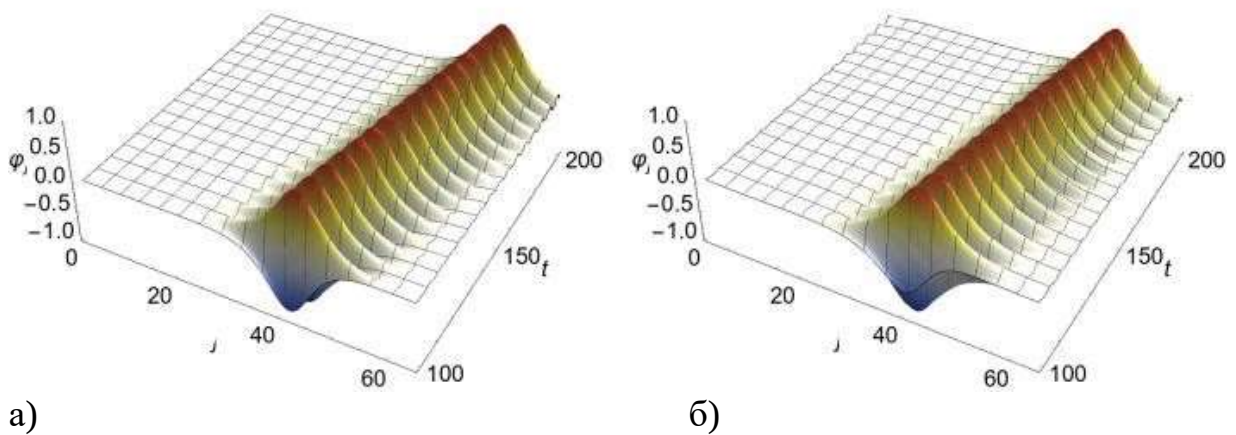


Рис.9 Эволюция локализованной волны (бризера) для а) исходной модели синус-решетки и б) ее континуального приближения. Результаты численного интегрирования с периодическими граничными условиями для начальных условий, соответствующих локализованной волне (бризеру).

Фазовые переходы типичной кристаллической структуры n-алканов с повышением температуры образца включают появление так называемой ротационной фазы с почти свободными вращательными движениями цепей вдоль их длинных осей, за которым следует переход к жидкой фазе. Очень хорошие результаты для моделирования динамики получены с помощью приближенной модели объединенных атомов для полиэтилена, которая сочетает наномасштабные взаимодействия с микромасштабными эффектами и дает основу для исследования фазовых переходов. Для изучения крутильной (либрационной) динамики цепей парафина, использована модель парафина в кристаллической фазе, основанная на приближении объединенных атомов. Модель описывает метиленовые группы как коллективные зерна с эффективным потенциалом взаимодействия, и без каких-либо внутренних степеней свободы. Упрощение позволяет изучать динамику углеродного остова без высокочастотных степеней свободы, которые не представляются

значительными для изучения фазовых переходов. Модель рассматривает парафиновые цепи как транс-зигзагообразные цепи ограниченной длины, упорядоченные в соответствии с триклинной симметрии кристалла. В случае, если все цепи параллельны, в одном из направлений, ортогональном к осям цепей они составляют «анти-ферромагнитную» цепь, когда все соседи имеют относительный сдвиг фазы, равный π . В другом направлении они не имеют сдвига и составляют «ферромагнитное» состояние. Мы рассматриваем деформации, действующие только крутильной (либрационной) динамики цепей парафинов, поэтому мы предполагаем, что валентные связи С-С и С-С-С плоские углы являются полностью жесткими и не деформированными. Это предположение применимо для короткоцепных парафинов, которые демонстрируют в экспериментах триклинную кристаллическую фазу, поскольку что их длина меньше или равна длине локализованных торсионных возбуждений, полученной в рамках в полноатомных молекулярно-динамических экспериментов. Для простоты мы предполагаем, что волновое число не равно нулю только в одном из направлений кристалла («анти-ферромагнитном»). Это предположение основано на том соображении, что межцепное взаимодействие в этом направлении является наиболее интенсивным и эволюция, например, локализованных возбуждений наиболее вероятна вдоль этой кристаллической оси.

Взаимодействие между цепочками описывается потенциалом ван дер Ваальса. Типичное представление имеет форму потенциала Леннард-Джонса с параметрами, взятыми из крупнозернистой модели полиэтилена. Суммарный потенциал взаимодействия разложен в ряд Фурье и в первом приближении получено уравнение движения в виде:

$$\frac{d^2\varphi_j}{dt^2} + A(\sin(\varphi_j + \varphi_{j-1}) + \sin(\varphi_j + \varphi_{j+1})) - B(\sin(\varphi_{j+1} - \varphi_j) - \sin(\varphi_j - \varphi_{j-1})) + C \sin(2\varphi_j) = 0.$$

Коэффициенты уравнения определяются численно из разложения потенциала взаимодействия и зависят от структуры кристалла.

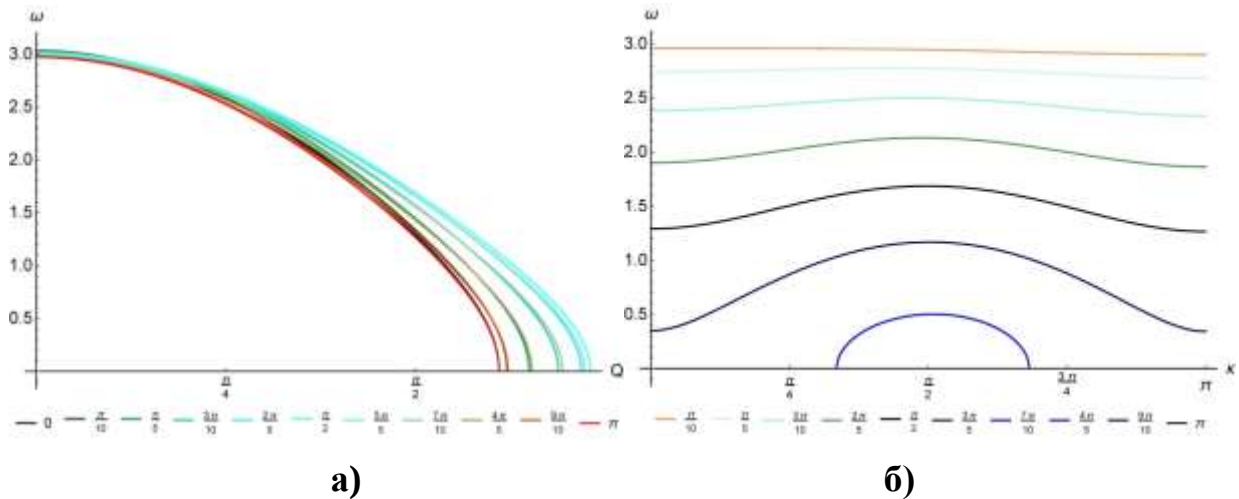


Рис. 10 а) Зависимость частоты ННМ модели крутильной динамики парафина от амплитуды возбуждения, различные цвета соответствуют различным волновым числам; б) дисперсионные кривые модели крутильной динамики парафина, различные цвета соответствуют различным значениям амплитуды возбуждения системы.

Поскольку тип нелинейности аналогичен рассмотренным в главе 2 тригонометрическим функциям, исследование динамики проводится при помощи полуобратного метода. Аналогично предыдущим результатам получен спектр нелинейных стационарных режимов при различных значениях амплитуды динамики Q .

$$\omega^2 = \frac{2}{Q} \left(2AJ_1 \left(2Q \cos \left(\frac{k}{2} \right) \right) \cos \left(\frac{k}{2} \right) + 2BJ_1 \left(2Q \sin \left(\frac{k}{2} \right) \right) \sin \left(\frac{k}{2} \right) + CJ_1(2Q) \right).$$

Обнаружено, что для более низких значений амплитуды частота однородного режима (синфазной моды) имеет наименьшее значение, в то время как частота антифазного режима (π -моды) имеет наивысшее значение. Когда значение амплитуды близко к $\pi/2$ происходит инверсия спектра: частота π -моды приближается к значению частоты однородной моды, в то время как все остальные частоты имеют более высокие значения. Аналогичное явление наблюдалось при рассмотрении короткой цепи с крутильной подвижностью, рассмотренной в главе 2.

Если не учитывать в приближенном рассмотрении волнового уравнения перекрестные члены, то упрощенные уравнения демонстрируют аналогичный спектр, также демонстрирующий инверсию при увеличении амплитуды динамики. В континуальном (длинноволновом) приближении уравнения динамики сводятся к континуальному уравнению.

$$\varphi''(c^2 + A \cos(2\varphi) + B) - 2A \sin(2\varphi) - A\varphi'^2 \sin(2\varphi) = 0.$$

Для волнового уравнения удастся получить аналитическое решение в виде периодических существенно нелинейных волн, форма которых, благодаря нелинейности, существенно зависит от амплитуды.

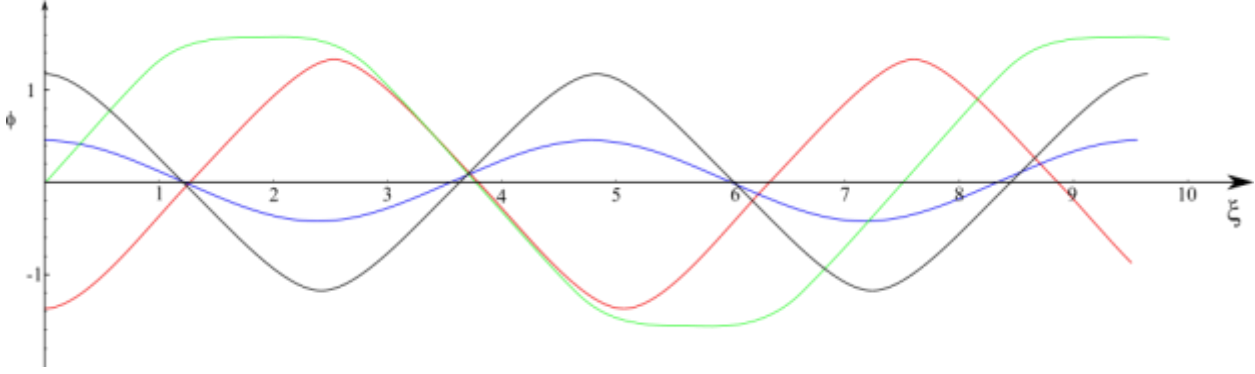


Рис.11. Профили волн $\varphi(t)$ для волнового уравнения крутильной динамики парафина.

Раздел 2.4 посвящен результатам исследования динамики молекулы ДНК, связанной с процессами локального торсионного раскрытия пар оснований. Для исследования режимов межцепного обмена локально возбужденной ДНК, рассматривается досконально проверенная модель Якушевич.

$$H = \sum_n \left\{ \frac{1}{2} I_{n,1} \dot{\psi}_{n,1}^2 + \frac{1}{2} I_{n,2} \dot{\psi}_{n,2}^2 + \varepsilon_{n,1} \sin^2 \frac{\psi_{n+1,1} - \psi_{n,1}}{2} + \right. \\ \left. \varepsilon_{n,2} \sin^2 \frac{\psi_{n+1,2} - \psi_{n,2}}{2} + V_{\alpha,\beta}(\psi_{n,1}, \psi_{n,2}) \right\} \\ V_{\alpha,\beta}(\psi_{n,1}, \psi_{n,2}) = C_1(1 - \cos \psi_{n,1}) + C_2(1 - \cos \psi_{n,2}) - C_{12}(1 - \cos(\psi_{n,1} - \psi_{n,2})),$$

где параметры определяются следующим образом:

$$C_1 = K_{\alpha\beta} r_\alpha (r_\alpha + r_\beta), C_2 = K_{\alpha\beta} r_\beta (r_\alpha + r_\beta), C_{12} = \frac{1}{4} K_{\alpha\beta} \left(1 - \frac{\omega_{\alpha\beta 2}}{\omega_{\alpha\beta 1}} \right) (r_\alpha + r_\beta)^2,$$

$\omega_{\alpha\beta 1}, \omega_{\alpha\beta 2}$ частоты вращательных колебаний в одну сторону и в противоположные стороны, соответственно, $K_{\alpha\beta}$ соответствует жесткости взаимодействия пар оснований. Взаимодействие в цепи учитывается в приближении ближайших соседей. Два первых члена функции Гамильтона представляют кинетическую энергию n -й пары оснований, $I_{n,1}, I_{n,2}$ моменты инерции n -го основания первой и второй цепей соответственно. Третий и четвертый члены описывают взаимодействие соседних пар оснований вдоль каждой из цепей макромолекулы. Параметр $\varepsilon_{n,1} = \varepsilon_{n,2} = \varepsilon_{al}$ характеризует

энергию взаимодействия n -го основания с $(n-1)$ -м основанием i -й цепи ($i=1,2$). Последний член Гамильтониана представляет энергию взаимодействия между связанными основаниями различных цепей.

Рассматривается форма В молекулы ДНК; двойная спираль рассматривается как две связанные цепи эквивалентных маятников. Модель допускает различные типы локализованных волн, в том числе солитоны и бризеры. В численных исследованиях наблюдались бризеры, переходящие с одной цепи на другую или локализация бризера на одной цепи в зависимости от значения параметра связи между двумя цепями.

Для изучения возможности передачи бризеров между цепями или локализации на одной цепи мы прибегаем к методу коллективных координат. Мы полагаем, что бризер передается между цепями медленно из-за слабой связи. Это позволяет нам рассматривать решение в форме бризеров на каждой цепи, все параметры мы считаем зависящими от сверхмедленного масштаба времени, определяемого малостью связи.

$$\tilde{\varphi}_1 = A_1 \operatorname{sech}(a_1(x - V_1\tau)) \exp(i(x - V_1\tau)\xi_1 + i\sigma_1);$$

$$\tilde{\varphi}_2 = A_2 \operatorname{sech}(a_2(x - V_2\tau)) \exp(i(x - V_2\tau)\xi_2 + i\sigma_2);$$

Тогда получается интеграл движения в следующей форме:

$$N_0 = \frac{1}{a}(A_1^2 + A_2^2),$$

Наличие такого инварианта позволяет рассмотреть слабое распространение возбуждения и описать динамику с учетом дисперсии. Когда амплитуда возбуждения снижается, ширина решения растет. Если предположить, что дисперсия мала, так что в течение одного акта передачи возбуждения амплитуда и ширина бризера меняется слабо, можно приближенно рассматривать новый интеграл движения как сохранение нормы, или интеграл типа чисел заполнения

$$N_1 = A_1^2 + A_2^2.$$

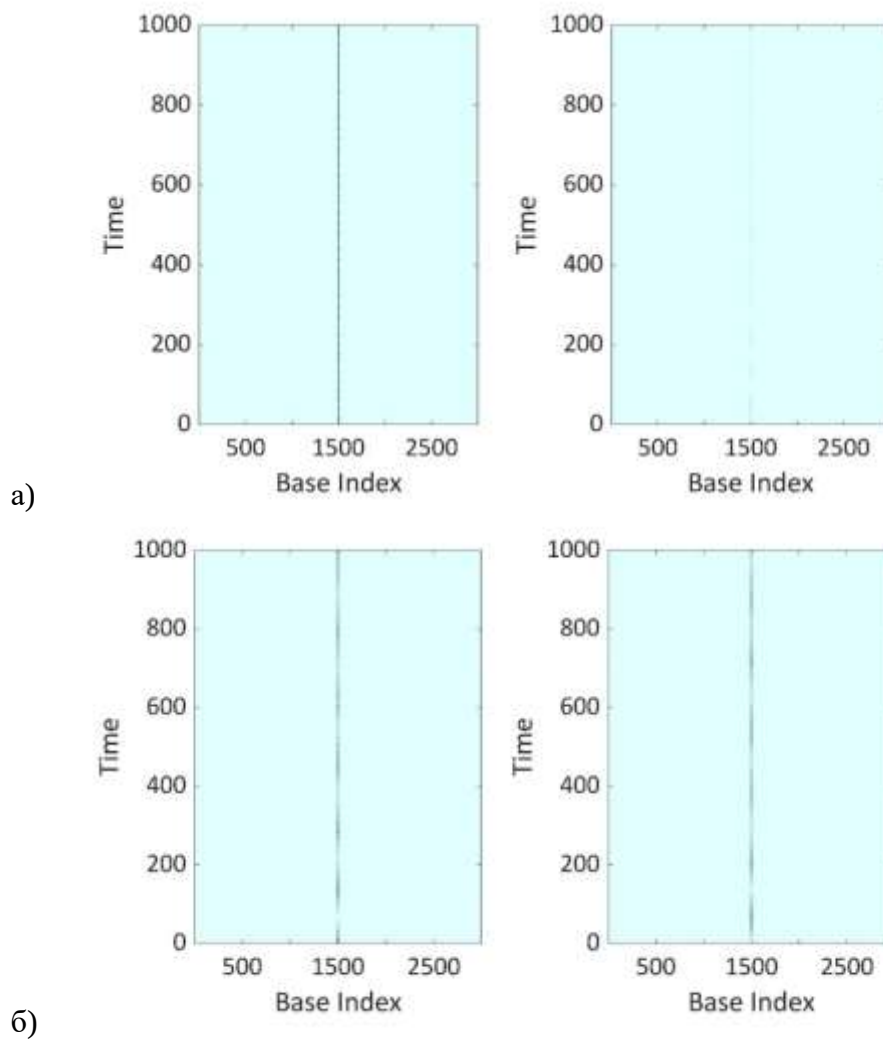


Рис. 12. Эволюция бризера в пространстве и времени, соответствующая различным значениям параметра связи и амплитуды: а) бризер, локализованный на одной цепи, б) бризер, который переносится между двумя цепями. Левые фрагменты демонстрируют эволюцию бризера первой цепи, правые фрагменты демонстрируют эволюцию бризера на второй цепи. Все результаты моделирования получены для исходной модели.

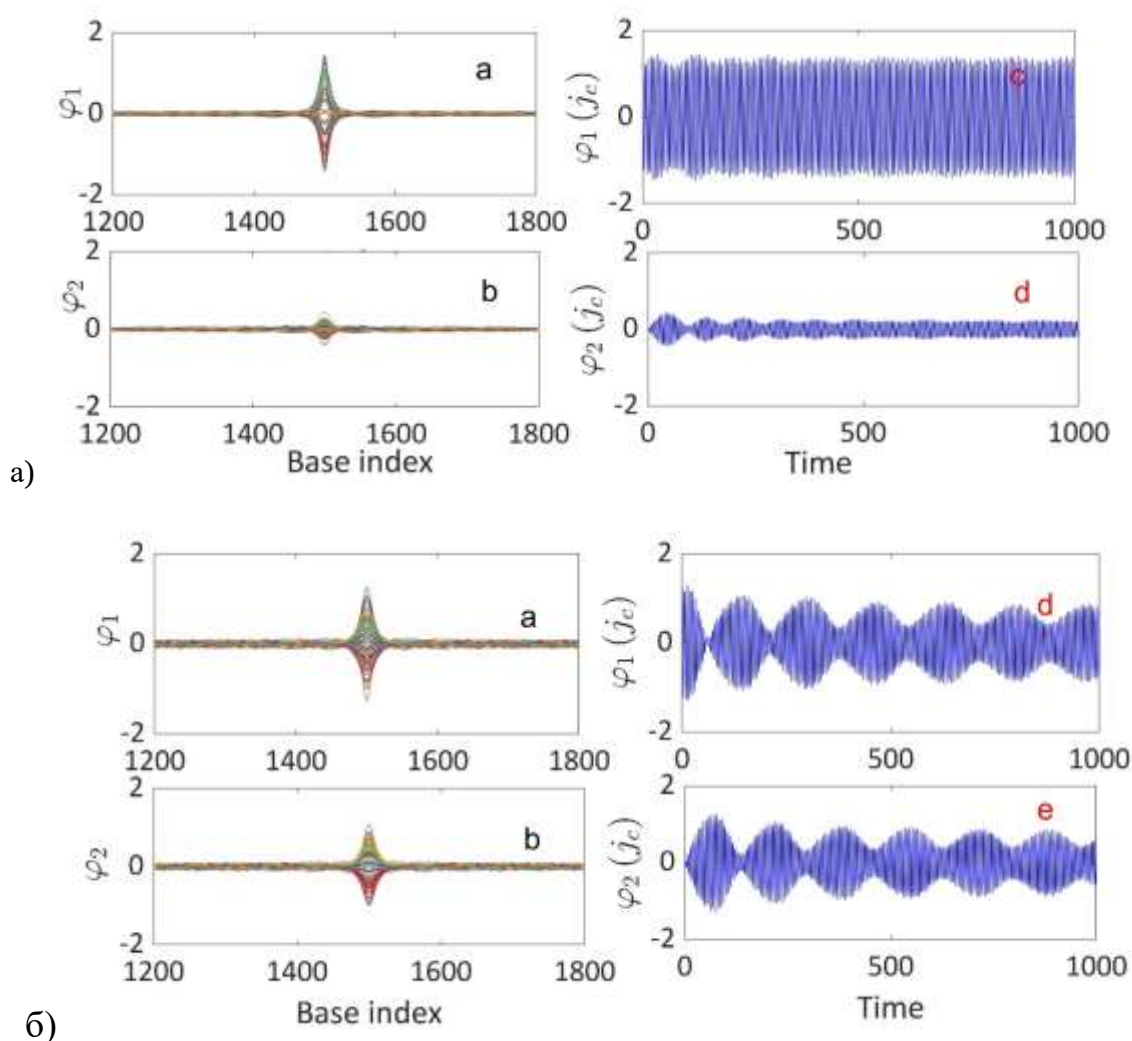


Рис. 13. Профиль бризера и эволюция во времени среднего элемента крутильной модели межцепного взаимодействия в макромолекуле ДНК, соответствующие: а) локализации волны (бризера) на одной из цепей, б) интенсивному переносу волны (бризера) между цепями; левый столбец: профили обеих цепей в разные моменты времени, правый столбец – эволюция во времени среднего элемента каждой из цепей.

Чтобы доказать применимость асимптотического анализа и проверить его результаты, на рис. 12 продемонстрирована эволюция системы, с начальными условиями соответствующими возбуждению в виде бризера, исходно помещенного только на одну из двух цепей. Согласно результатам анализа, о которых говорилось выше, можно наблюдать локализацию бризера на одной из цепей или перенос бризера между цепями в сверхмедленном масштабе времени. Прогноз поведения для модели двухцепной модели ДНК работает довольно хорошо для определенного диапазона параметров, соответствующих слабой связи и небольшой амплитуды возбуждения. Здесь продемонстрирована реализация межцепного переноса локализованной волны (бризера). Профили в

разные моменты времени демонстрируют расплывание энергии, которая распространяется постепенно от центра бризера к концам каждой цепи. Как и ожидалось, локализованные возбуждения расплываются, а ширина сигнала увеличивается, в то время как амплитуда возбуждения падает. Однако, пока амплитуда фонового возбуждения не будет намного ниже амплитуды фоновых колебаний, анализ будет по-прежнему справедлив.

Еще одна макромолекулярная система, которая исследована при помощи нелинейной цепной модели – это нанотрубка на подложке. Нанотрубка это макромолекула, представляющая собой лист графена, свернуты в полый цилиндр. Нанотрубки имеют существенную анизотропию механических свойств, высокую продольную (аксиальную) и относительно малую поперечную (радиальную) жесткость. Благодаря этому, при достаточно больших диаметрах, нанотрубки из-за слабого нековалентного взаимодействия атомов могут переходить из полый цилиндрической формы в коллапсированное состояние. Невалентное взаимодействие с подложкой также может изменить цилиндрическую форму нанотрубки. В результате молекулярно-динамического исследования нанотрубок различного диаметра (т.е. с различными значениями индекса хиральности) на подложке карбида кремния был обнаружен двухъямный вид энергии нанотрубки на подложке для индекса хиральности в диапазоне от 20 до 40. Более узкая потенциальная яма соответствует коллапсированному состоянию, в то время как более широкая соответствует раскрытому состоянию нанотрубки. Энергии обоих возможных состояний неравны и существенно зависят от взаимодействия с подложкой и диаметра нанотрубки. В настоящей работе рассматривается частный случай, который наблюдается для индекса хиральности $m=31$, когда уровни энергии для обоих состояний становятся практически эквивалентными. В молекулярно-динамических расчетах показано, что при низких температурах нанотрубка заданного диаметра схлопывается, при больших температурах нанотрубка раскрывается, и скорость фронта раскрытия нанотрубки увеличивается с увеличением температуры.

В таком случае можно описать нанотрубку как цепочку связанных элементов в двухъямном вырожденном потенциале.

$$u_{tt} - c_0^2 u_{xx} + \omega^2 V_0(u) = -\gamma u_t + \zeta(x, t),$$

$$V(u) = \begin{cases} \omega_1^2 (u - u_1), & u < u_0, \\ \omega_2^2 (u - u_2), & u > u_0. \end{cases}$$

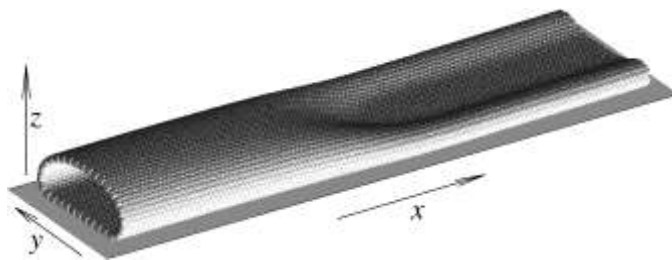


Рис.14. Вид углеродной нанотрубки с индексом хиральности (31,31), расположенной на плоской подложке, образованной поверхностью кристалла карбида кремния 6HSiC (0001). Левый конец нанотрубки находится в открытом стационарном состоянии (поперечное сечение нанотрубки имеет форму выдвинутой капли), правый конец находится в коллапсированном стационарном состоянии (поперечное-сечение имеет форму асимметричной гантели с плоской двухслойной центральной частью). В средней части нанотрубки образуется локализованная область его плавного перехода из одного стабильного стационарного состояния в другое стационарное состояние.

где $u = h_{cm}/h_c$ эффективная координата, имеющая смысл координаты состояния нанотрубки, которое можно охарактеризовать как координату центра масс, h_{cm} –размерное расстояние от центра масс одного элемента до подложки. Координаты центра масс можно вычислить непосредственно из конфигурации нанотрубки как для коллапсированного, так и для открытого состояния. Если нанотрубка задана в наполовину коллапсированном, наполовину раскрытом состоянии, то в зависимости от температуры она будет постепенно раскрываться или схлопываться. Процесс схлопывания или раскрытия соответствует движению локализованной волны (фронта) вдоль продольной оси нанотрубки. Чтобы описать зависимость движения такой локализованной волны (кинка или антикинка) от температуры, можно воспользоваться описанием фронта как броуновской квазичастицы в термостате с неоднородным потенциалом.

$$M_0 \ddot{X} = -\gamma M_0 \dot{X} \mp (\Delta + \dot{A}_{th} + \xi(t)),$$

где $X(t)$ координата центра масс квазичастицы (кинка или антикинка), M_0 ее эффективная масса, A_{th} представляет эффект теплового воздействия, и $\xi(t)$ гауссов шум с нулевым средним и автокорреляционной функцией $\langle \xi(t)\xi(0) \rangle = 2M_0 k_B T / \chi_0 \delta(t)$.

В зависимости от температуры термостата меняется неоднородность потенциала и становится более энергетически выгодным одно из двух устойчивых состояний нанотрубки. При этом скорость и направление движения

фронта зависит от температуры и от вероятностей нахождения каждого элемента в обеих потенциальных ямах, соответствующих раскрытому и коллапсированному состояниям, и определяется формой этих потенциалов, или, другими словами, частотой колебаний вблизи обоих минимумов.

Для расчетов используется приближенный бипараболический потенциал $V(u)$ (см. рис.13) для случая $m = 31$. Предполагая, что два минимума потенциала соответствуют одинаковой энергии, мы получаем соотношение для скорости фронта раскрытия нанотрубки:

$$v_{th} = c_0 \frac{k_B T}{2 E_0} \frac{\omega_0 (\omega_1 - \omega_2)}{\gamma} = \frac{k_B T}{2 I A \omega_0} \frac{\omega_0 (\Omega_1 - \Omega_2)}{\gamma}$$

где постоянная $I = E_0 / (\omega_0 c_0 A) = \int_{u_1}^{u_2} \sqrt{V(u)} du$ определяется профилем потенциала, Ω_1, Ω_2 являются двумя характерными частотами движения в окрестности стационарных состояний, γ параметр трения, $A = h_c m_0$ определяет масштаб системы.

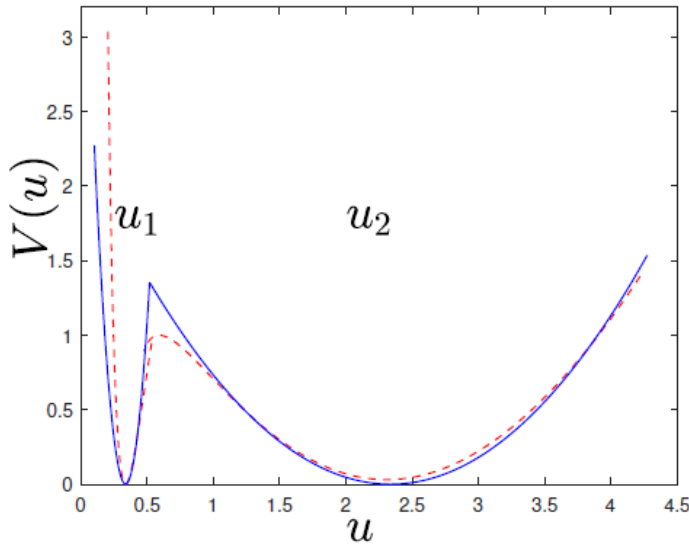


Рис.15. Вид бистабильного потенциала $V(h)$ для нанотрубки с индексом $m = 31$, полученный из профиля энергии в молекулярно-динамическом моделировании (линия 1), и его приближение бипараболическим потенциалом (линия 2)

Сравнение аналитической температурной зависимости скорости с результатами, полученными численно из моделирования нанотрубки с хиральностью (31,31), представлено на рис.14. Получено довольно хорошее соответствие в области низких температур. Для более высоких значений температуры нелинейный характер зависимости скорости не предсказан анализом, поскольку предположения, сделанные для формулировки задачи для квазичастицы могут стать неприменимыми для более высоких температур. Однако такое хорошее соответствие полученной аналитически скорости с

численными результатами позволяет сделать вывод, что рассмотренное явление имеет энтропийный характер.

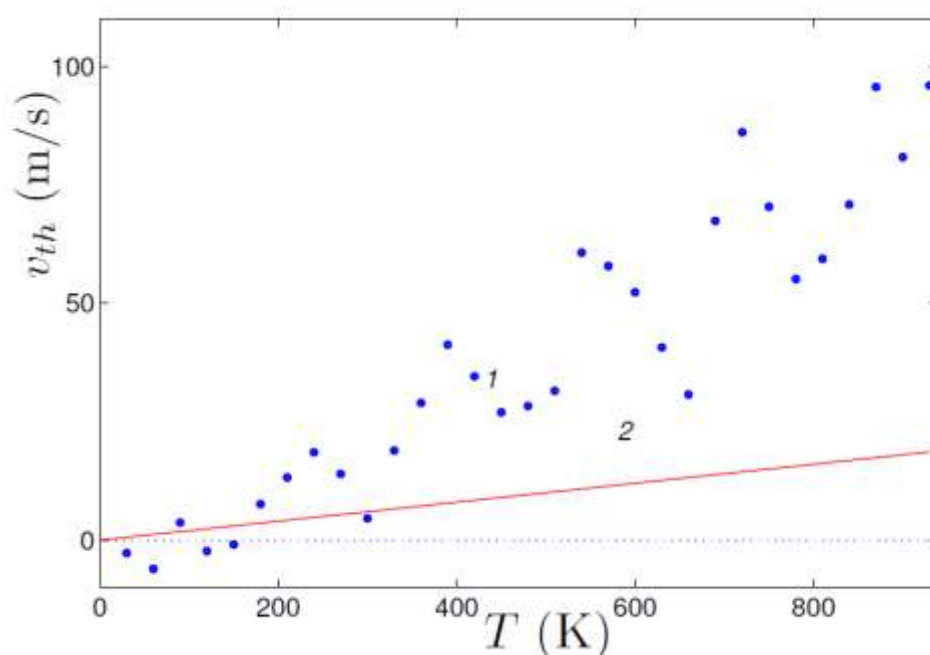


Рис.16. Скорость солитона от температуры для УНТ с индексом $m = 31$, полученная из молекулярно-динамических расчетов (синие точки 1) и сравнение с теоретическим выражением для вырожденного би-параболического приближенного потенциала (линия 2).

Таким образом, в четвертой главе приведены результаты исследования различных моделей макромолекулярных структур и полимерных сред при различных процессах, не предполагающих малость амплитуд динамики. При анализе крутильной динамики модели кристалла парафина и модели гибкоцепной макромолекулы использован разработанный и апробированный в главе 2 полуобратный метод. Он позволил провести исследование нелинейных спектров, процессов распространения энергии и волн. При анализе двухцепной модели ДНК исследован процесс межцепного обмена локализованными волнами. При анализе динамики нанотрубки на подложке использована эффективная цепная модель и рассмотрена эволюция локализованной волны при изменении температуры. Полученные результаты важны как для понимания механизмов процессов энергопереноса и распространения волн в макромолекулярных структурах и полимерных средах, так и для описания свойств и процессов, связанных с распространением тепла, фазовыми и структурными переходами и .

В четвертой главе рассматриваются колебания, возникающие при трении слоев внутри слоистых материалов, композитов с наполнителями и на

контактирующих поверхностях, а также вопрос распространения таких колебаний. Для описания колебаний, вызванных трением, используются, в числе прочих, модели, описывающие трение как процесс взаимодействия автоколебательных локальных элементов и структур. При использовании мезоскопического подхода к описанию процессов трения, они играют роль твердых включений и фрагментов на границе двух контактирующих поверхностей.

Недавно появились работы, в которых исследовано формирование предельных циклов и их локализация и распространение в среде и эволюция автоколебаний с течением времени. Однако, исследования локализованных возбуждений и распространения фронтов проводились для модели очень общего вида. В диссертационной работе описан процесс трения при помощи нелинейной модели Релея с заданным видом зависимости от скорости относительного движения. Для заданного вида закона трения проведен асимптотический анализ и получена редуцированная модель. Оказывается, что асимптотическая модель для рэлеевских связанных осцилляторов совпадает по виду с асимптотической моделью, исследованной в кандидатской диссертации автора, - модели связанных осцилляторов Ван дер Поля. Поэтому многие из результатов, полученных для этой модели можно использовать для исследования процессов распространения энергии автоколебаний в слоистых средах и структурах и на поверхности контакта. В недавних работах автора были расширены эти исследования и выявлено влияние нелинейности, диссипации и неоднородностей на процессы передачи энергии в системах связанных автоколебательных элементов.

Рассматривается обобщенная модель осцилляторов Рэлея с нелинейной зависимостью трения от скорости, считается, что цепочка частиц движется с некоторой скоростью V относительно подложки, упругая сила описывается линейной k_g и нелинейной k_3 жесткостью, вязкое трение имеет параметр c - параметр вязкого трения:

$$m \frac{d^2 q_j}{dt^2} + c \frac{dq_j}{dt} + k_g q_j + k_3 q_j^3 - k(q_{j-1} - 2q_j + q_{j+1}) = p\mu \left(V - \frac{dq_j}{dt} \right),$$

где μ - феноменологический коэффициент трения.

Зависимость коэффициента трения от относительной скорости можно описывать различными функциями. Обычно, есть несколько особенностей

зависимости функции трения от скорости – нечетность (т.е. независимость от направления движения) и наличие разрыва вблизи нуля. Однако, в случае не чистого сухого трения, возможен не разрыв в характеристике трения вблизи нуля, а ее быстрый рост. Автором рассматривается случай, который описывается во многих работах, при этом вблизи нуля скорости, мы будем считать трение гладкой функцией с быстро нарастающим значением силы:

$$\mu(V_{rel}) = \left(\mu_d + \frac{\mu_\sigma - \mu_d}{\cosh \alpha_f V_{rel}} \right) \tanh \beta_f V_{rel}$$

Параметры μ_σ и μ_d описывают форму кривой, α_f и β_f описывают крутизну кривой (скорость нарастания силы) в области малых скоростей. В окрестности заданной скорости движения характеристика закона трения может быть разложена по нечетным степеням скорости. Тогда уравнения движения можно представить в упрощенном виде:

$$\frac{d^2 u_j}{dt^2} + u_j + 8\alpha\epsilon u_1^3 - 2\beta\epsilon(u_{j-1} - u_j + u_{j+1}) = -2\epsilon \left(\gamma - 4b \left(\frac{du_1}{dt} \right)^2 + 8d \left(\frac{du_1}{dt} \right)^4 \right) \frac{du_1}{dt}$$

Суть нестационарного явления устойчивого энергообмена между автоколебательными элементами можно проиллюстрировать во всех деталях, на модели двух слабо соединенных автоколебательных осцилляторов. После этого анализ можно обобщить на цепи с большим числом степеней свободы. Для системы из двух автоколебательных элементов проведен асимптотический анализ, позволяющий аналитическое предсказание поведения системы.

В симметричной системе из двух колебательных элементов возможно существование двух типов движения: синфазного (согласованное движение в одном направлении) и противофазного (согласованного движения в противоположных направлениях). Обоим типам движения соответствуют два типа симметрии в системе. Для нахождения возможности существования нового типа устойчивых движений, проведен анализ на существование дополнительных симметрий в системе (при помощи метода групп Ли). При определенном соотношении между коэффициентами диссипации и уровнем возбуждения системы, у системы появляется новый интеграл движения, который является нормой, (или интегралом чисел заполнения). Наличие такого интеграла в системе позволяет упростить описание системы, ввести новые эффективные параметры, определяющие эволюцию системы: $k = \frac{3\alpha N}{2\beta}$, $\lambda = \frac{N^2 d}{8\beta}$

и $g = \frac{\kappa}{\beta}$ параметр нелинейности, параметр диссипации, а также частотной растройки между двумя элементами, зависят от параметров исходной системы.

Проведенное упрощение также позволяет найти и описать стационарный режим интенсивного переноса энергии между двумя колебательными элементами. Удастся также найти аналитическое условие для порогового значения параметров системы для перехода от интенсивного энергообмена между двумя элементами к локализации энергии на одном из них и обратного перехода. Обнаружено, что увеличение уровня возбуждения, уменьшение связи и увеличение растройки, увеличение трения и нелинейности приводят локализации энергии на одном из двух колебательных элементов.

Также показано, что результаты анализа справедливы не только для частного случая, соответствующего условиям существования нового типа симметрии, но в очень широком диапазоне параметров и уровня возбуждения. Используя данные, полученные для системы двух рэлеевских элементов, проанализированы также процессы локализации возбуждения и распространения волн вдоль цепи. Обнаружено, что эффективные параметры, определяющие распространение возбуждения вдоль цепи из двух элементов, оказываются эффективными для описания распространения возбуждения вдоль длинной цепи.

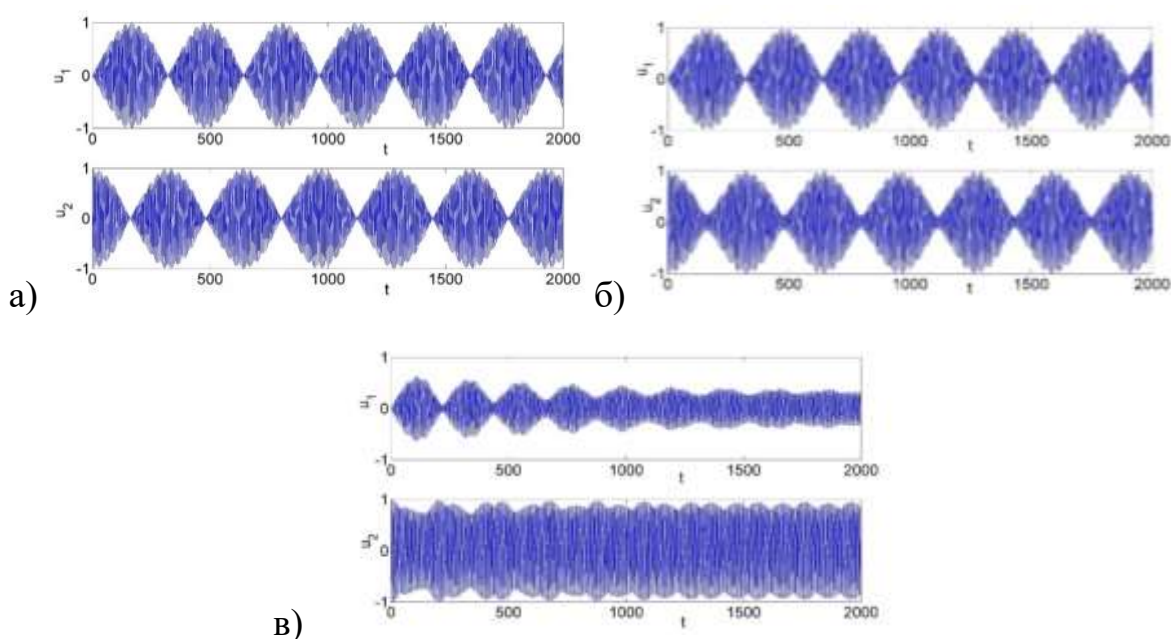


Рис. 17 Эволюция двух связанных рэлеевских элементов при разных значениях параметра частотной растройки: а) без растройки – идентичные элементы; б) слабая растройка; в) сильная растройка.

Таким образом, в четвертой главе рассмотрены процессы распространения энергии (колебаний) вдоль материала с трением слоев. При этом найдены закономерности наличия или отсутствия распространения энергии вдоль таких сред. Полученные результаты важны для описания процессов распространения колебаний, вызванных трением для широкого спектра материалов и композитных сред.

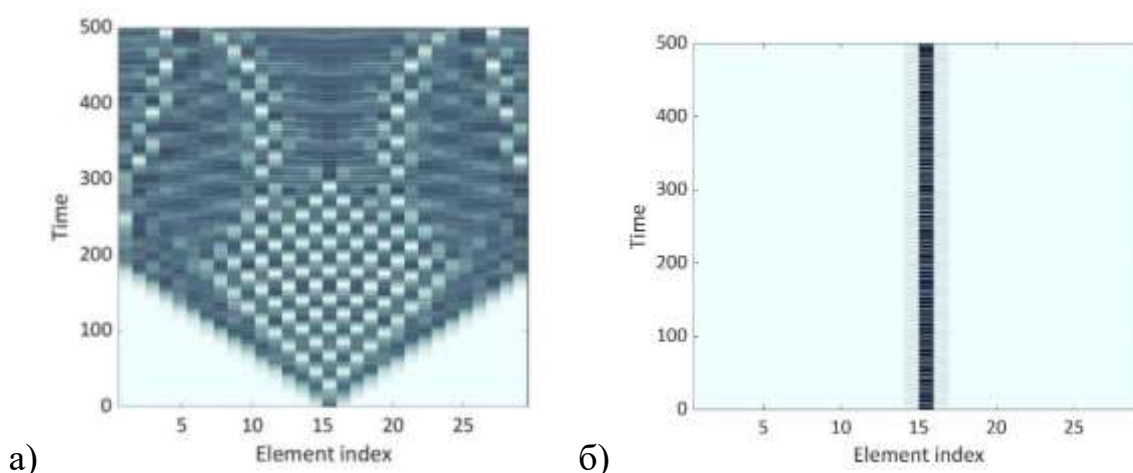


Рис. 18 Эволюция во времени системы цепи из 32 рэлеевских элементов при исходно возбужденно среднем элементе. а) малые значения эффективного параметра диссипации, б) большое значение эффективного параметра диссипации.

В пятой главе изложено исследование механизма однонаправленного переноса энергии в совершенно симметричных гранулярных цепях и их ансамблях в акустических метаматериалах. Вначале рассмотрен новый механизм необратимой, однонаправленной передачи энергии в идеально симметричной модели двух связанных гранулярных элементов. Этот механизм рассматривается на системе двух нелинейных колебательных элементов, взаимодействующих друг с другом через сильно нелинейный потенциал взаимодействия. Мы рассматриваем как случай герцевской нелинейности, соответствующей гранулярным средам без предварительного сжатия, так и более общий тип элементов. Поскольку степень нелинейности взаимодействия гранулярных элементов с подложкой и соседями может существенно варьироваться в зависимости от формы жестких элементов и от степени предварительного сжатия материала, что рассмотрение нелинейности общего типа является оправданным для описания гранулярных систем. В работе показано, что такая система может демонстрировать однонаправленный перенос энергии. Кроме того, некоторые из режимов, возникающих в таких моделях, описаны аналитически.

Динамика двух связанных гранулярных элементов может быть описана следующим образом:

$$\frac{d^2 x_1}{dt^2} + x_1 + \varepsilon \gamma \frac{dx_1}{dt} + \varepsilon x_1 |x_1|^a = \mu \varepsilon (x_2 - x_1)^{p+1},$$

$$\frac{d^2 x_2}{dt^2} + x_2 + \varepsilon \gamma \frac{dx_2}{dt} + \varepsilon x_2 |x_2|^a = \mu \varepsilon (x_1 - x_2)^{p+1}.$$

где x_1, x_2 — смещения первого и второго элементов, γ представляет собой параметр вязкого трения, ε является формальным безразмерным, малым параметром, который масштабирует величину диссипации, локальной консервативной нелинейности и связи, параметры a и p характеризуют величину нелинейности локального потенциала и потенциала взаимодействия, соответственно.

Для системы двух связанных частиц проведен анализ механизма однонаправленной передачи энергии, возникающей в низкоразмерной модели (см. Рис.19). Предполагая трение в системе достаточно слабым, можно сформулировать приближенный аналитический критерий для параметров системы (например, диапазон параметра трения для фиксированного уровня первоначального возбуждения), который обеспечивает необратимую передачу энергии от первоначально возбужденного элемента ко второму за один период биений. Показано, что необратимый перенос возможен только если степень нелинейности связи между частицами больше чем степень локальной нелинейности.

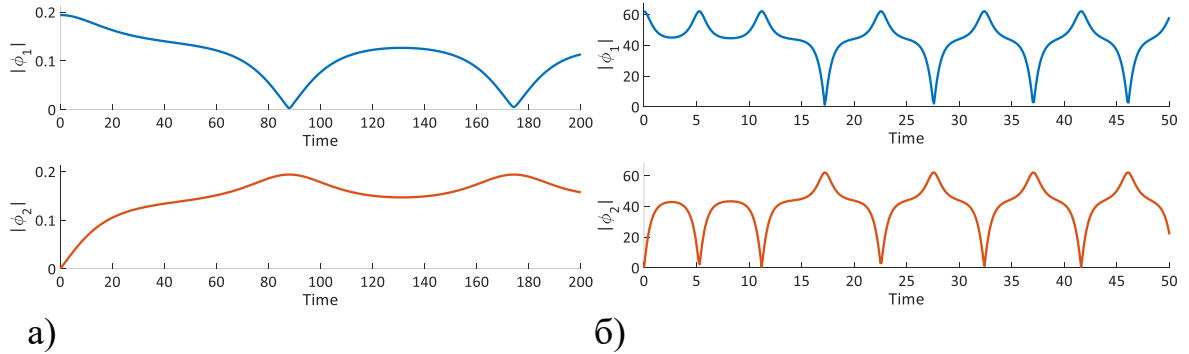


Рис.19. Энергоперенос между связанными гранулярными элементами для разных значений степени связи. Левый фрагмент а) необратимая однонаправленная передача энергии, параметры системы, степень нелинейности связи выше степени локальной нелинейности. Правый фрагмент б) переход от локализации энергии на возбужденном осцилляторе к обмену энергией между осцилляторами, степень нелинейности связи ниже степени локальной нелинейности.

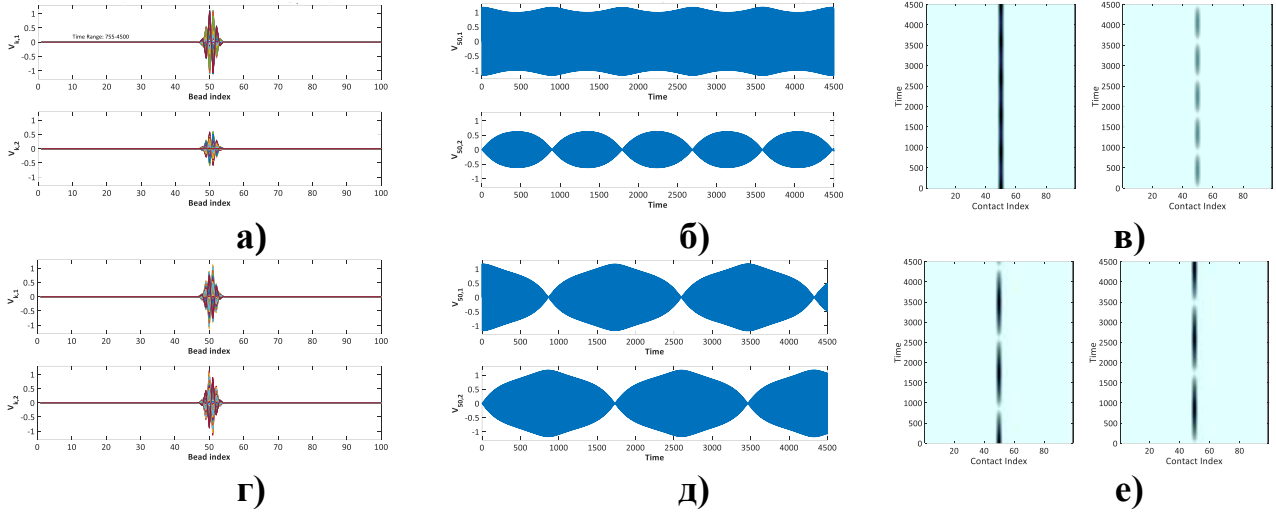


Рис.20. Эволюция двух слабо связанных гранулярных цепей с начальными условиями в виде локализованной волны (бризера) с центром на связи без учета трения. Верхняя строка а)-в): Локализованные колебания при малой связи. Нижняя строка г)-е): Интенсивный синхронный обмен энергией между цепями при увеличении связи. Левый столбец а) и г) демонстрирует амплитуды частиц от их номера в разные моменты времени. Центральный столбец б) и д) демонстрирует эволюцию во времени скорости центральных частиц обеих цепей. Правый столбец в) и е) демонстрирует пространственно-временную эволюцию бризеров на обеих цепях, когда левый фрагмент и правый фрагмент соответствуют первоначально возбужденной первой цепи и исходно покоившейся второй цепи, соответственно.

На основании описания связанных гранулярных частиц исследовано взаимодействие гранулярных цепей в массиве.

$$\begin{aligned} \frac{d^2 x_{n,1}}{dt^2} + \gamma \frac{dx_{n,1}}{dt} + x_{n,1} &= \varepsilon \left[(x_{n-1,1} - x_{n,1})_+^{1+a} - (x_{n,1} - x_{n+1,1})_+^{1+a} \right] - \mu \varepsilon (x_{n,1} - x_{n,2}) |x_{n,1} - x_{n,2}|^p \\ \frac{d^2 x_{n,2}}{dt^2} + \gamma \frac{dx_{n,2}}{dt} + x_{n,2} &= \varepsilon \left[(x_{n-1,2} - x_{n,2})_+^{1+a} - (x_{n,2} - x_{n+1,2})_+^{1+a} \right] - \mu \varepsilon (x_{n,2} - x_{n,1}) |x_{n,2} - x_{n,1}|^p \end{aligned}$$

Межцепное взаимодействие определяется двумя параметрами, силой связи $\mu = O(1)$ и степенью нелинейности связи $p = 2k, k = 1, 2, 3, \dots$. Индекс «+» в нелинейном слагаемом означает только отталкивающий характер взаимодействия между частицами в каждой цепочке.

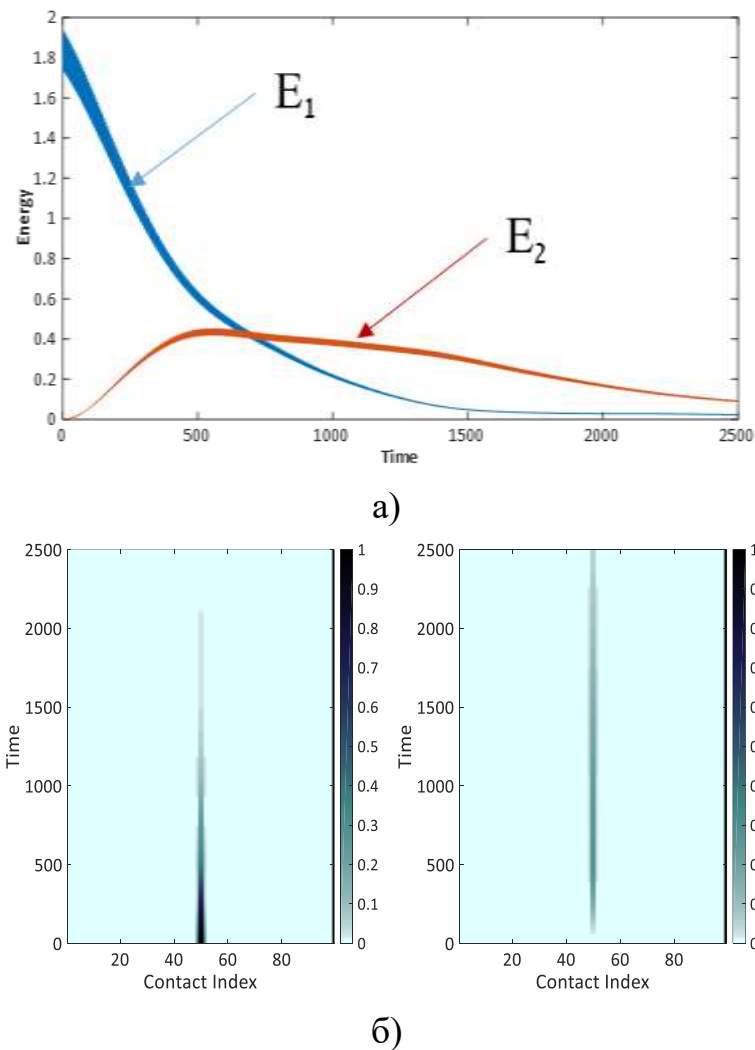


Рис.21. Необратимая и однонаправленная передача энергии в системе двух слабо связанных гранулированных цепей. а) мгновенные энергии обеих цепей; б) пространственно-временная диаграмма мгновенных энергий обеих цепей. Каждая цепь состоит из 100 элементов.

К массивам гранулярных цепей применен аналогичный анализ для предсказания диапазона параметра трения, обеспечивающего однонаправленную передачу между цепями стационарных локализованных волн (бризеров). Получено предсказание диапазона трения для фиксированного значения начальной энергии, в котором возможен однонаправленный перенос энергии. Он хорошо согласуется с данными, полученными на основе численного моделирования полной двухцепной модели.

В пятой главе описан процесс однонаправленного переноса энергии в гранулярном метаматериале при наличии трения. Найдены механизмы

управления процессом передачи энергии и сформулированы критерии для возможности однонаправленной передачи энергии. Полученные результаты представляют теоретическую основу для конструирования гранулярных метаматериалов (композитов) с заданными свойствами, в том числе для нужд поглощения энергии и виброзащиты.

Основные результаты и выводы

1. Исследована колебательная динамика модели физического маятника под действием внешней параметрической силы без ограничений на амплитуды колебаний, то есть в случае, когда традиционные методы анализа оказываются некорректными. Проведена апробация полубратного метода исследования для существенно нелинейного объекта с крутильной подвижностью.
2. Исследована колебательная динамика в коротких нелинейных цепях, состоящих из двух и трех элементов. Найдено влияние типа нелинейности на особенности распространения энергии вдоль таких цепей. Построены аналитические предсказания для пороговых значений параметров перехода от локализации энергии на одном конце цепи к интенсивной энергопередаче.
3. Для короткой цепи с крутильной подвижностью, описываемой существенно-нелинейной моделью синус-решетки, состоящей из трех элементов, получено описание перехода от локализации энергии на конце цепи к интенсивному переносу энергии вдоль цепи. Исследованы спектры режима интенсивного энергопереноса.
4. Для одноцепной модели крутильной подвижности гибкоцепных полимеров были исследованы нелинейные нормальные моды в широком диапазоне амплитуд возбуждения. Охарактеризованы зависимости частот и волновых чисел от амплитуды, в низкоамплитудном пределе результаты согласуются с известными результатами для модели Френкеля-Конторовой. С увеличением амплитуды спектр приобретает особенности, не описанные ранее: пропадает антифазная мода и появляется запретная зона. В длинноволновом пределе рассмотрено взаимодействие нормальных мод и аналитически сформулированы условия пространственной локализации энергии и интенсивного энергообмена. Также найдены локализованные волны (бризеры), для

которых описан профиль. Все аналитические данные находятся в соответствии с численно полученными результатами.

5. Для моделей крутильной динамики кристаллов парафинов исследованы нелинейные спектры в широком диапазоне амплитуд. Найдено новое явление инверсии спектра, когда при увеличении амплитуды исходно наибольшие частоты становятся наименьшими. В упрощенной модели крутильной динамики молекул парафина в кристалле найден и описан аналитически новый тип крутильных локализованных и периодических волн. Исследована зависимость формы волн от параметров скорости и параметров кристалла.
6. При исследовании межцепного взаимодействия в двухцепной модели ДНК в асимптотической модели рассмотрен процесс межцепной передачи локализованных крутильных нелинейных волн. В малоамплитудном пределе найден новый вид закона сохранения, описывающий как дисперсионное распывание бризеров, так и межцепной обмен. В случае слабой дисперсии описано изменение фазового пространства и сформулированы критерии интенсивной передачи возбуждений и ее локализации. Все аналитически полученные результаты находятся в согласии с численными данными.
7. Для модели процесса схлопывания и раскрытия нанотрубки на подложке при разных температурах качественно описана зависимость скорость фронта коллапсирования от температуры. Доказан энтропийный характер процесса. Результаты анализа согласуются с данными молекулярно-динамического эксперимента.
8. Проанализировано влияние нелинейности и диссипации на цепь рэлеевских элементов, являющейся моделью автоколебаний, вызванных трением (рэлеевская модель), которые возникают в слоистых материалах и средах, при скользящем контакте различных материалов и поверхностей, особенно в присутствии твердых частиц наполнителя и фрагментов в эластичной среде. Показано, что увеличение трения, нелинейности или уменьшение связи приводит к переходу от распространяющихся в среде фронтов возбуждения автоколебаний к локализации таких возбуждений.
9. Исследован нелинейный механизм, который определяет режим однонаправленной передачи энергии в слабо диссипативной симметричной системе двух нелинейно связанных гранулярных цепей. С использованием концепции ПФТ предсказано формирование

специальных нестационарных режимов энергообмена. Показано, что разница между степенями нелинейности локального нелинейного потенциала и потенциала связи определяет существование такого режима.

10. Предсказан диапазон параметра трения, позволяющий продемонстрировать однонаправленный перенос энергии от возбужденной гранулярной цепи к исходно невозбужденной. Найденный механизм успешно реализован для пассивного контроля локализованных возбуждений (стационарных дискретных бризеров) в массиве слабо связанных нелинейных цепей. Показано, что асимптотический анализ дает верные предсказания для исходного уровня энергии .

Список работ, опубликованных по теме диссертации

1. Kislovsky V., Kovaleva M., Jayaprakash K. R., and Starosvetsky Y. Consecutive transitions from localized to delocalized transport states in the anharmonic chain of three coupled oscillators // *Chaos*. –2016. –V. 26. – 073102.
2. Kovaleva M.A., Manevich L.I., Pilipchuk V.N. Nonconventional synchronization and energy localization in weakly coupled autogenerators // *Phys. Rev.E*. – 2016. – 94. –032223.
3. Ковалева М.А., Смирнов В.В., Маневич Л.И. Стационарная и нестационарная динамика системы двух гармонически связанных маятников // *Нелинейная динамика*. – 2017. – Т. 13. – № 1. – С. 105–115
4. Kovaleva M.A., Manevich L.I., Pilipchuk V.N. Non-conventional phase attractors and repellers in weakly coupled autogenerators with hard excitation, *EPL*. –2017. –V.120. –30007
5. Kovaleva M.A., Smirnov V.V., Manevitch L.I. The nonlinear model of the librational dynamics of the paraffin crystal // *Materials Physics and Mechanics*. – 2018. – V.35. –P. 80 –86.
6. Vorotnikov K., Kovaleva M. and Starosvetsky Y. Emergence of non-stationary regimes in one- and two-dimensional models with internal rotators // *Phil. Trans. R. Soc. A*. – 2018. – V.376. – 20170134.
7. Smirnov V.V., Kovaleva M.A., Manevitch L.I. Nonlinear Dynamics of Torsion Lattices // *Rus. J. Nonlin. Dyn.* – 2018. – V.14. – 2. – P.179–193.
8. Kovaleva M.A., Kosevich Yu.A., Smirnov V.V., Manevitch L.I. Beats in the system of three non-linear oscillators and their quantum analog // *Comm. Nonl. Sci.and Num. Simul.* –2019. –V. 74 . – P.138-146.
9. Kovaleva M., Romeo F., Manevitch L. Stationary and non-stationary oscillatory dynamics of the parametric pendulum// *Comm. in Nonl. Sci.and Num. Simul.* –2019. – V.76. –P. 1–11.
10. Kovaleva M.A., Smirnov V.V., Manevitch L.I. Nonstationary dynamics of the sine lattice consisting of three pendula (trimer) // *Phys. Rev.E*. – 2019. – V.99. – 012209
11. Kovaleva M.A., Manevich L.I., Pilipchuk V.N. Non-linear Beatings as Non-stationary Synchronization of Weakly Coupled Autogenerators // *Problems of Nonlinear Mechanics and Physics of Materials, Advanced Structured Materials* / By eds. Andrianov I.V. et al. – 2019. – V. 94. – P. 53-83.

12. Yacobi G., Kislovsky V., Kovaleva M., Starosvetsky Y. Unidirectional energy transport in the symmetric system of non-linearly coupled oscillators and oscillatory chains // *Nonlinear Dynamics* . – 2019. – V. 98. – P. 2687–2709
13. Kovaleva M., Smirnov V., Romeo F., Manevitch L. Nonlinear dynamics of a pendulum under parametric excitation // 14th Conference on Dynamical Systems: Theory and Applications (DSTA 2017). Abstracts (ISBN 978-83-935312-3-3) / Eds Awrejcewicz J., Kaźmierczak M., Mrozowski J., Olejnik P. – Łódź, 2017– P.57.
14. Ковалева М.А., Смирнов В.В., Маневич Л.И. Исследование системы двух гармонических маятников. // Труды X Всероссийской научной конференции им. Ю.И. Неймарка «Нелинейные колебания механических систем» Нижний Новгород, 26 – 29 сент. 2016. –Р.464-469.
15. Ковалева М.А., Смирнов В.В., Маневич Л.И. Исследование системы двух гармонических маятников. // Труды X Всероссийской научной конференции им. Ю.И. Неймарка «Нелинейные колебания механических систем» Нижний Новгород, 26 – 29 сент. 2016. –Р.464-469.
16. Kovaleva M.A., Smirnov V.V., Manevitch L.I. Librational nonlinear dynamics of the paraffin crystal // 9th International Symposium “Molecular Mobility and Order in Polymer Systems St. Petersburg, Peterhof, June 19-23, 2017” Book of abstracts. – Saint Petersburg, 2017. – P.48 (O24).
17. Ковалева М.А., Маневич Л.И. Межцепной обмен возбуждениями в модели ДНК // Сборник тезисов Восьмая Всероссийская Каргинская конференция «Полимеры в стратегии научно-технического развития РФ «Полимеры — 2020» 9-13 ноября 2020. – С.301
18. Kovaleva M., Manevitch L. Model of interchain excitation transport of DNA // Book of Abstracts XLVIII International Summer School-Conference “Advanced Problems in Mechanics 2019” June 24-29, 2019, St. Petersburg, Russia. Part2. – P. 15.
19. Kovaleva M., Manevitch L. Interchain energy exchange in the DNA coarse-grained model // 15th Conference on Dynamical Systems: Theory and Applications (DSTA 2019). Abstracts / Eds Awrejcewicz J., Kaźmierczak M., Mrozowski J., Olejnik P. – Łódź, 2019– P.131.
20. Kovaleva M.A., Savin A.V. Temperature-induced transition in carbon nanotube on a substrate // Graphene Canada Online Conference November 16-17,2020 (GC2020) Abstracts. – 32.
http://phantomsfoundation.com/GRAPHENECANADA/online2020/Abstracts/2020_Kovaleva_Margarita_32.pdf

21. Kovaleva M.A. and Starosvetsky Yu. Energy localization to energy transport in the system of weakly coupled granular chains // Book of Proceedings of the international conference “Nonlinear Dynamics on Complex Networks” in the frame of symposium “Topical Problems of Nonlinear Wave Physics” 17-23 July 2014, Nizhny Novgorod, Russia. – P.58 –59,
22. Kovaleva M., Kislovsky V., Yacobi G., Starosvetsky Y. Analysis and control of localized excitations in coupled essentially nonlinear chains // 4th International Conference on Vibro-impact systems and systems with contact and friction (ICoVIS2018) Book of Abstracts Kassel Germany, 1-4 Aug. 2018. – 67.
23. Kovaleva M., Manevitch L. Non-conventional phase attractors and repellers in weakly coupled autogenerators with hard excitation, Days on Diffraction, June 4 – 8, 2018, St. Petersburg, Russia. Books of abstracts, 64-65
24. Kislovsky V., Kovaleva M.A. and Starosvetsky Yu. Damped driven response of granular chain // 15th Conference on Dynamical Systems: Theory and Applications (DSTA 2019). Abstracts / Eds Awrejcewicz J., Kaźmierczak M., Mrozowski J., Olejnik P. – Łódź, 2017– P.170