РЕАКЦІЙНІ РІВНЯННЯ

Однорідні динамічні системи

Постановка задачі

$$\frac{dx}{dt} = f(x,t), \qquad x(0) = x_0$$

Потенціальні системи

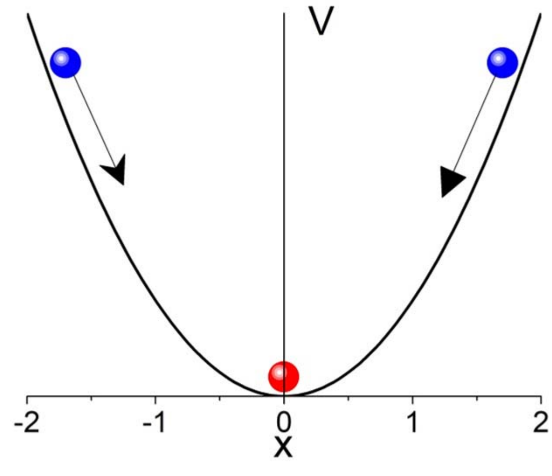
$$\frac{dx}{dt} = f(x), \qquad f(x) = -\frac{dV}{dx}, \qquad x(0) = x_0$$

Стаціонарні стани

$$\frac{dx}{dt} = 0 \ \Rightarrow \ f(x) = 0$$

Приклад:

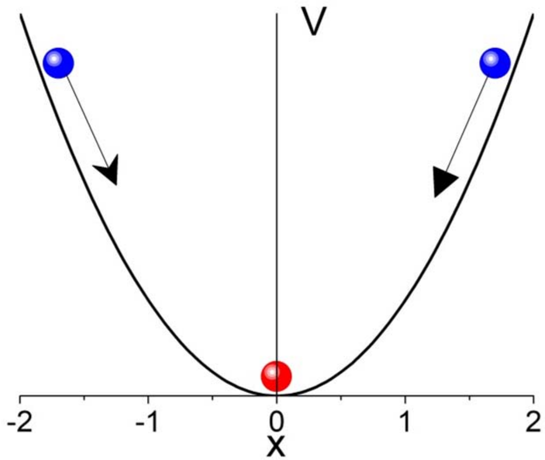
$$V(x) = x^2$$



Однорідні динамічні системи

Потенціальні системи

$$\frac{dx}{dt} = f(x), \qquad f(x) = -\frac{dV}{dx}, \qquad x(0) = x_0$$

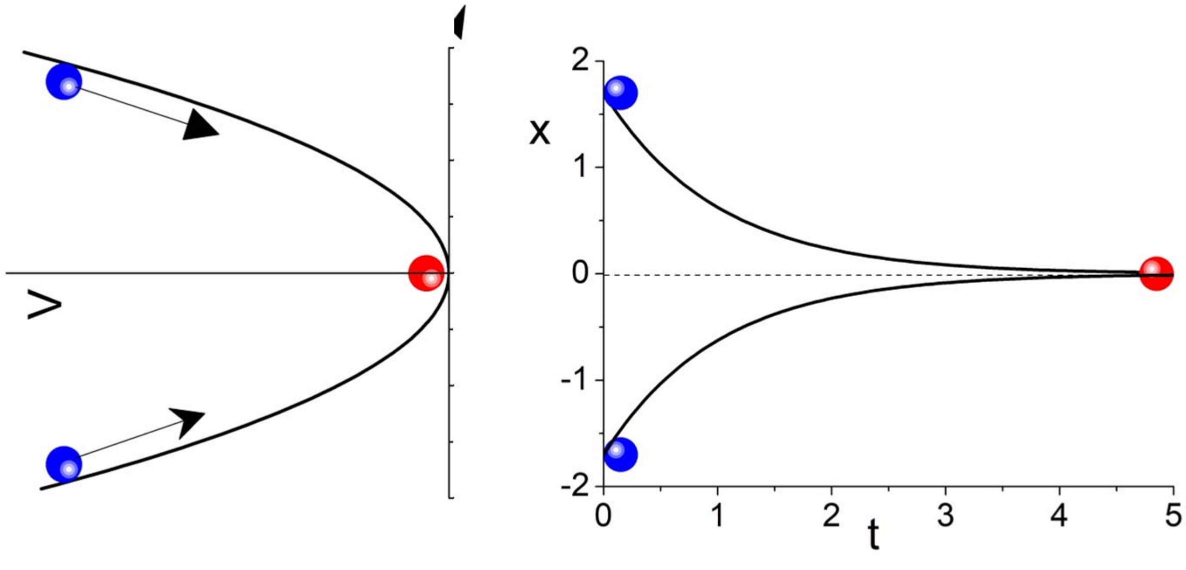


Стаціонарні стани

$$\frac{dx}{dt} = 0 \;\; \Rightarrow \;\; f(x) = 0$$

Приклад:

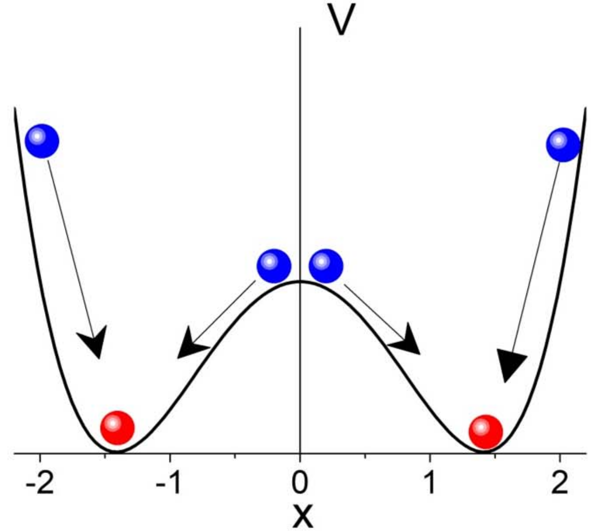
$$V(x) = x^2$$



Однорідні динамічні системи

Потенціальні системи

$$\frac{dx}{dt} = f(x), \qquad f(x) = -\frac{dV}{dx}, \qquad x(0) = x_0$$

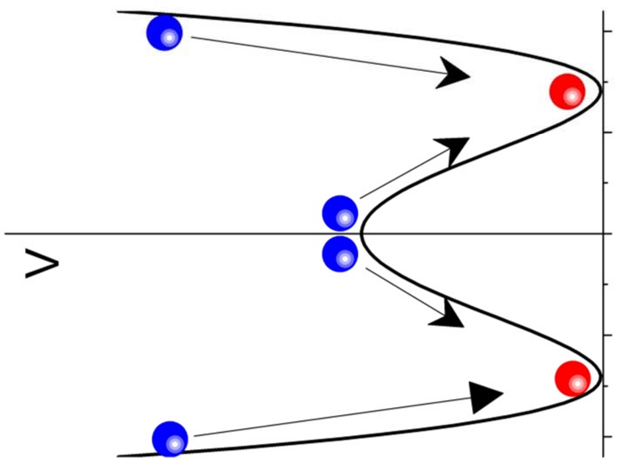


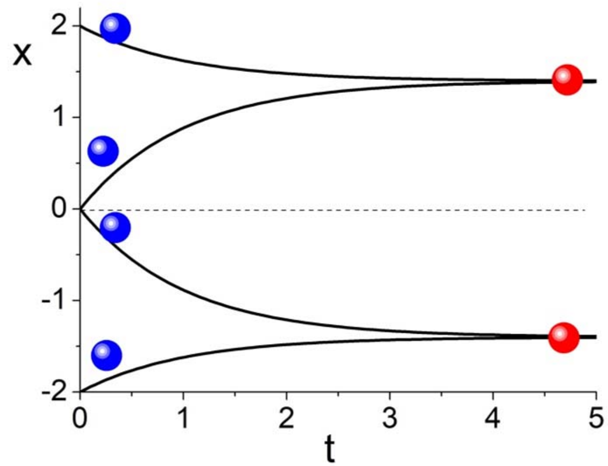
Стаціонарні стани

$$\frac{dx}{dt} = 0 \quad \Rightarrow \quad f(x) = 0$$

Приклад:

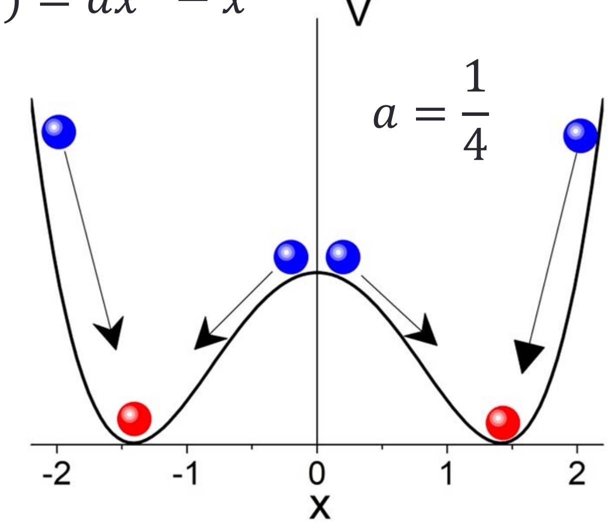
$$V(x) = ax^4 - x^2$$





Однорідні динамічні системи

$$V(x) = ax^4 - x^2$$



Потенціальні системи

$$\frac{dx}{dt} = f(x), \qquad f(x) = -\frac{dV}{dx}, \qquad x(0) = x_0$$

Стаціонарні стани x_i

$$\frac{dx}{dt} = 0 \quad \Rightarrow \quad f(x) = 0$$

$$f(x) = 0 \Rightarrow 2x - 4ax^3 = 0 \Rightarrow x_1 = 0; \;\; x_{2,3} = \pm\frac{1}{\sqrt{2a}}$$

Стійкість стаціонарних станів:

$$f(x) = f(x_i) + \left.\frac{df}{dx}\right|_{x=x_i}(x - x_i) + \cdots; \qquad \delta x = (x - x_i)$$

Розв’язок

$$\delta x \propto \exp(\lambda t): \qquad \frac{dx}{dt} = \frac{d\delta x}{dt} = \lambda \cdot \delta x; \qquad f(x_i) = 0$$

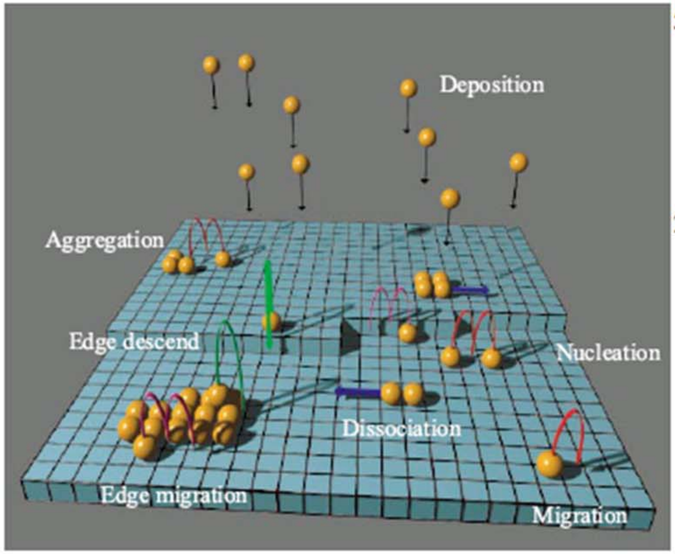
Характеристичне рівняння

$$\lambda \cdot \delta x = \left.\frac{df}{dx}\right|_{x=x_i}\delta x \Rightarrow \lambda = \left.\frac{df}{dx}\right|_{x=x_i}$$

$\lambda < 0$ – стійкий стан

$\lambda > 0$ – нестійкий стан

Формування структур адсорбату на поверхнях тонких плівок



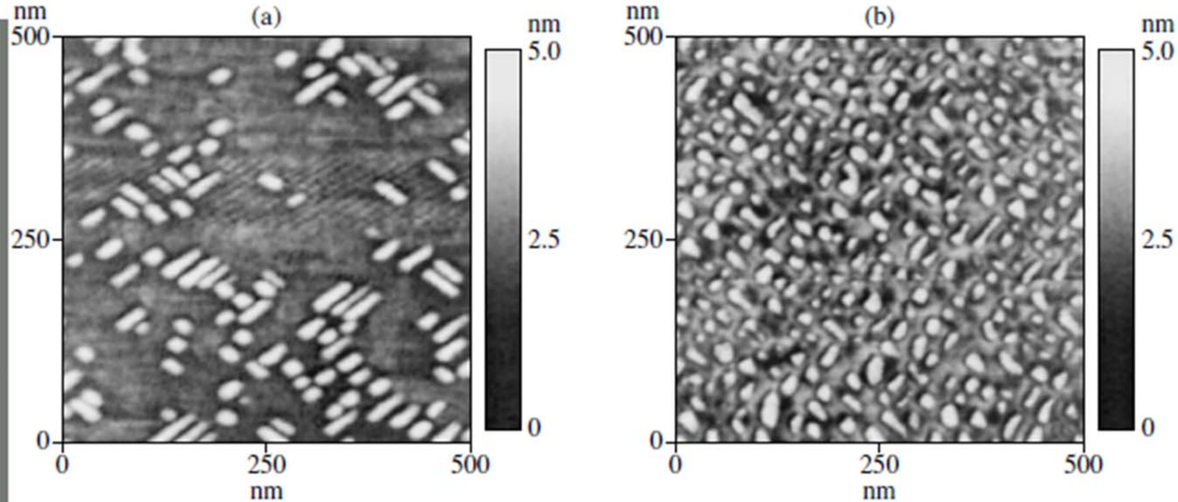
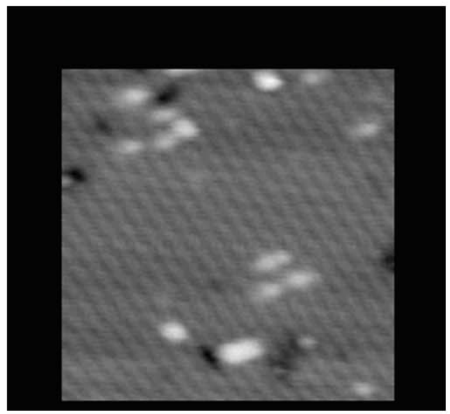


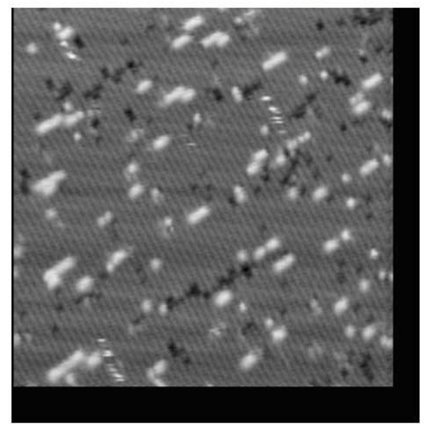
Fig. 3. Surface AFM image of a structure with a GeSi sublayer after the deposition of (a) 7 Å of Ge and (b) 9 Å of Ge.

(c) T = 130 °C

(d) T = 140 °C



1-dim



surface

Математична модель

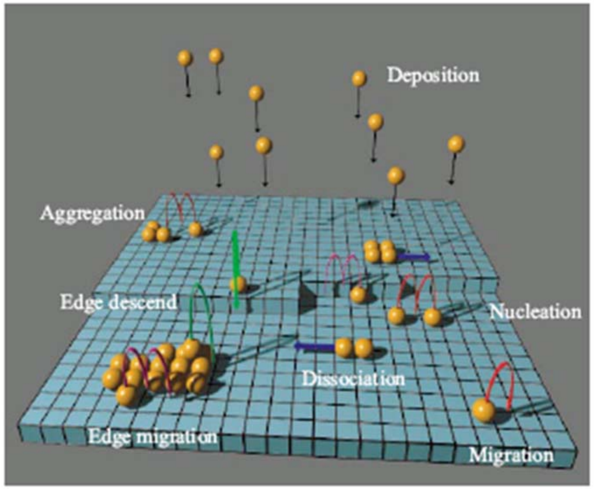
The local coverage at surface: $x(\mathbf{r}, t) \in [0, 1]$.

$$\frac{dx}{dt} = f(x),$$

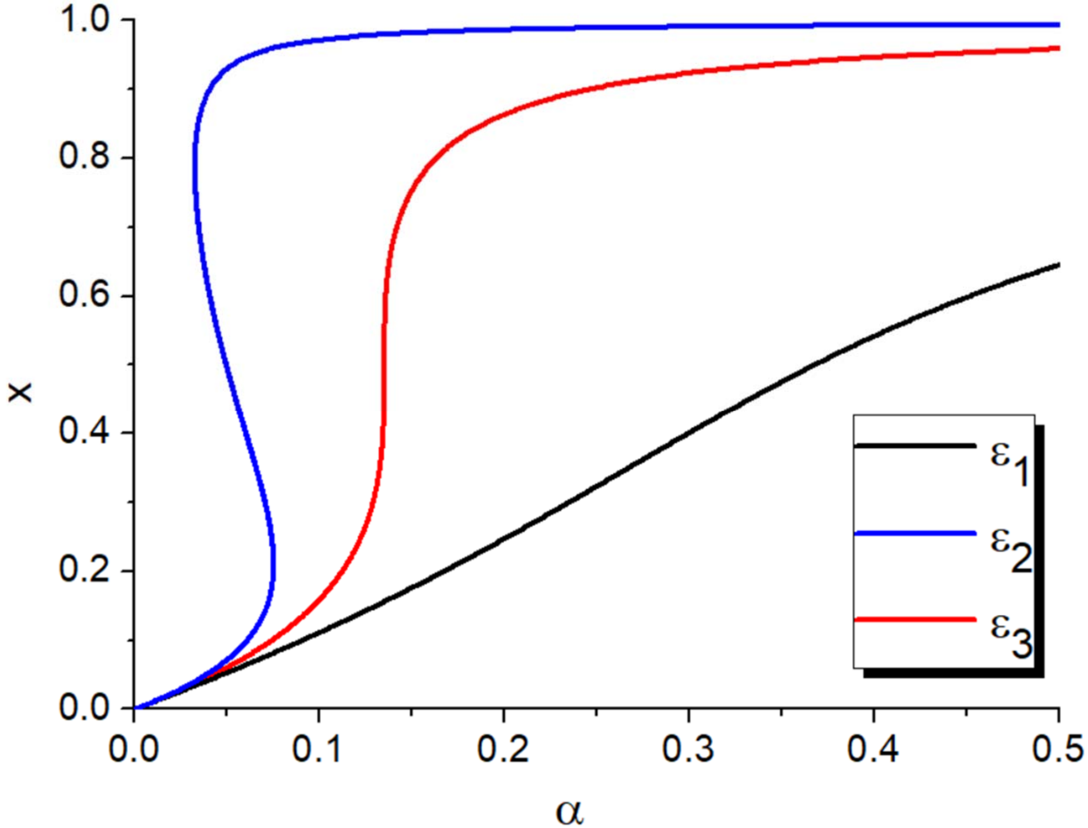
Equilibrium chemical reactions: $f(x) = adsorption + desorption$

- adsorption term: $k_a p(1 - x)$
- desorption term: $-k_d x,\ k_d = k_{d0}\exp(U(r)/T)$

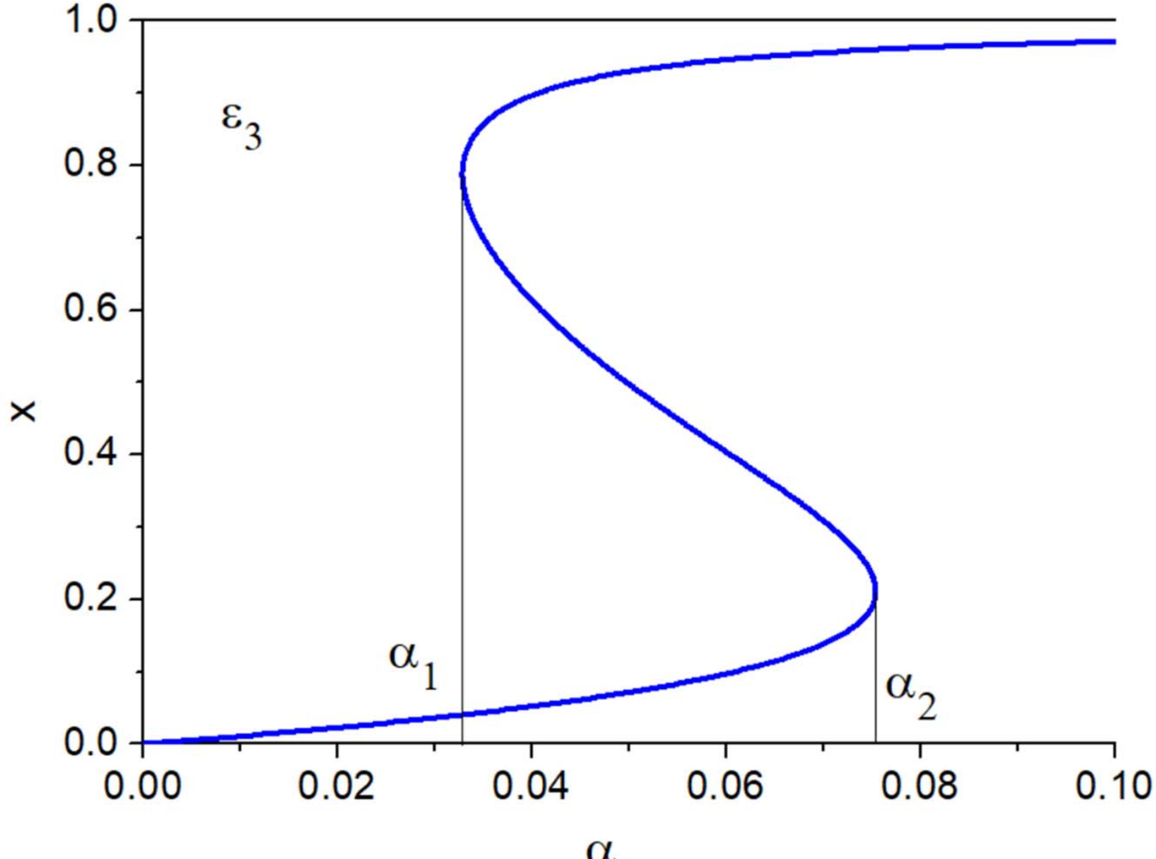
$$\frac{dx}{dt} = \alpha(1 - x) - x\exp(-\varepsilon x)$$



$$\frac{dx}{dt} = \alpha(1 - x) - x\exp(-\varepsilon x)$$



$$\frac{dx}{dt} = \alpha(1 - x) - x\exp(-\varepsilon x)$$



Стійкість стаціонарних станів

$$\frac{dx}{dt} = \alpha(1 - x) - x\exp(-\varepsilon x)$$

$$\frac{dx}{dt} = f(x) \qquad \frac{df}{dx} = -\alpha - (1 - \varepsilon x)\exp(-\varepsilon x)$$

Стійкість стаціонарних станів:

$$f(x) = f(x_i) + \left.\frac{df}{dx}\right|_{x=x_i} (x - x_i) + \delta x; = (x - x_i)$$

Розв’язок

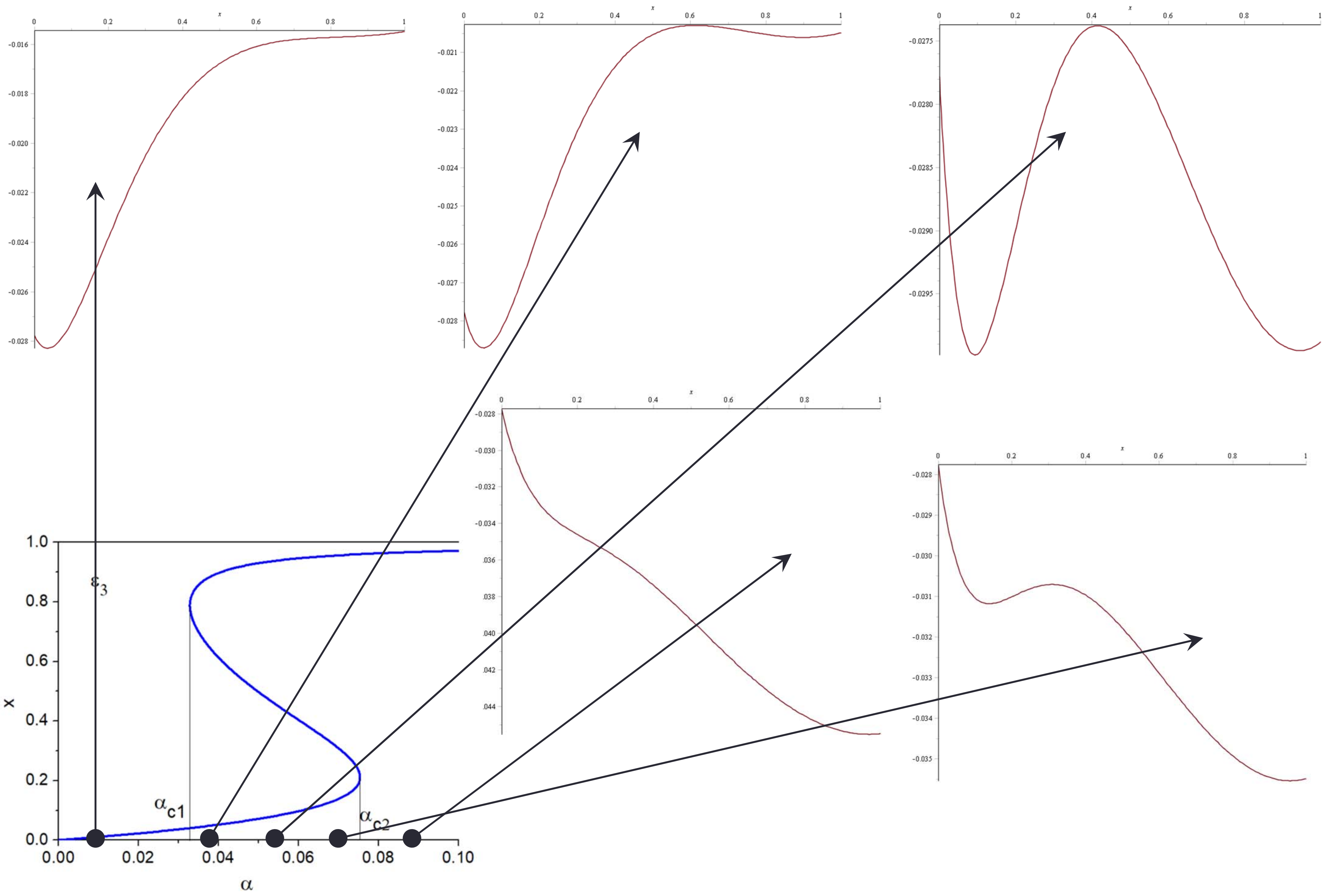
$$\delta x \propto \exp(\lambda t): \qquad \frac{dx}{dt} = \frac{d\delta x}{dt} = \lambda \cdot \delta x; \qquad f(x_i) = 0$$

Характеристичне рівняння

$$\lambda \cdot \delta x = \left.\frac{df}{dx}\right|_{x=x_i} \delta x \Rightarrow \lambda = \left.\frac{df}{dx}\right|_{x=x_i}$$

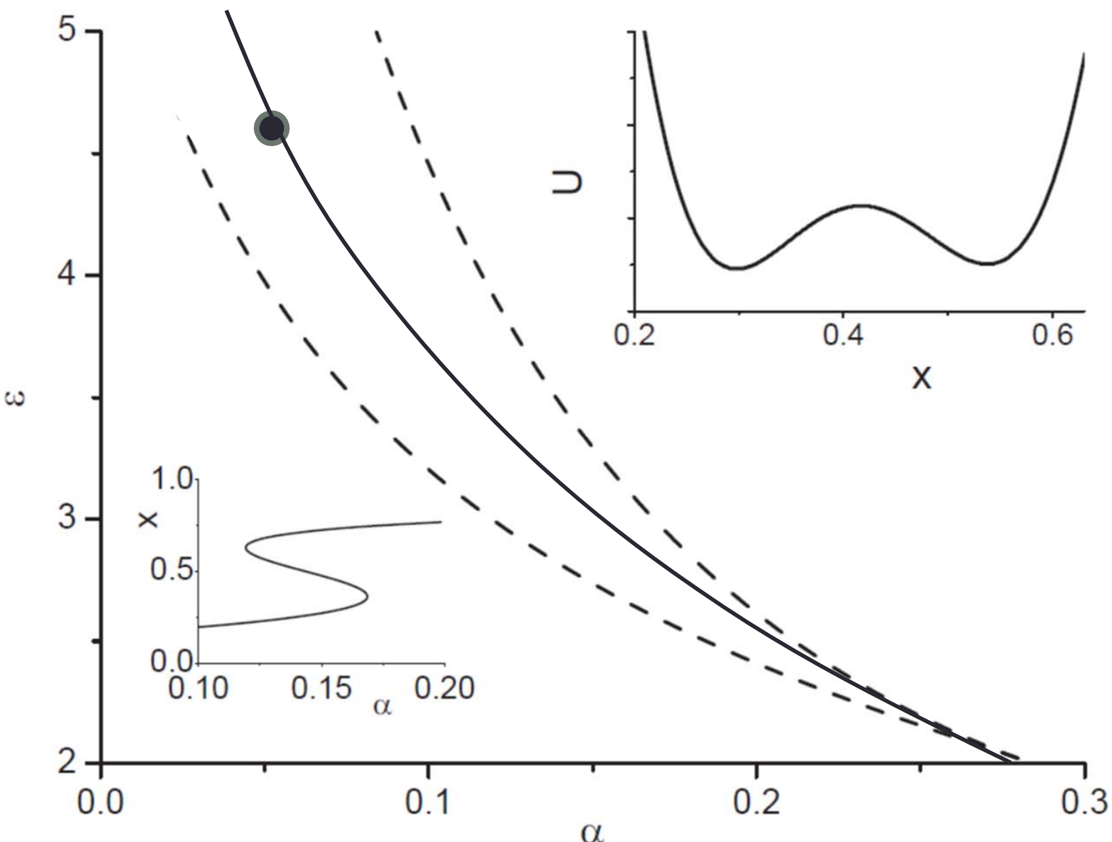
$\lambda < 0$ – стійкий стан

$\lambda > 0$ – нестійкий стан



1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
x
0.00
0.02
0.04
0.06
0.08
0.10
α
ε_3
α_{c1}
α_{c2}

$$\frac{dx}{dt} = \alpha(1 - x) - x\exp(-\varepsilon x)$$



Системи нелінійних рівнянь

- Система Лоренца
- $$\begin{cases} \tau_x \dfrac{dx}{dt} = \sigma(y - x) \\ \tau_y \dfrac{dy}{dt} = x(r - z) - y \\ \tau_z \dfrac{dz}{dt} = xy - bz \end{cases}$$
- Адіабатичне наближення:
  - $\tau_x \ll \tau_y;\ \tau_x \ll \tau_z;\ \tau_y = \tau_z$
  - $\tau_x = 0 \rightarrow \dfrac{dx}{dt} = 0 \rightarrow x = y$
  - $$\begin{cases} \dfrac{dy}{dt} = y(r - z) - y \\ \dfrac{dz}{dt} = y^2 - bz \end{cases}$$

Системи нелінійних рівнянь

- $$\begin{cases} \frac{dy}{dt} = y(r - z) - y \\ \frac{dz}{dt} = y^2 - bz \end{cases}$$

Стаціонарні стани: $\frac{dy}{dt} = 0;\ \frac{dz}{dt} = 0$

$$bz = y^2 \to z = \frac{y^2}{b}$$

$$y\left(r - \frac{y^2}{b}\right) - y = 0; \to y = 0; r - \frac{y^2}{b} = 1 \to \frac{y^2}{b} = r - 1 \to y = \pm\sqrt{b(r-1)}$$

Системи нелінійних рівнянь

- $$\begin{cases} \frac{dy}{dt} = f(y,z) \\ \frac{dz}{dt} = g(y,z) \end{cases}$$

Стаціонарні стани: $f(y,z) = 0; g(y,z) = 0$

Матриця Якобі

$$M = \begin{pmatrix} \frac{df(y,z)}{dy} - \lambda & \frac{df(y,z)}{dz} \\ \frac{dg(y,z)}{dy} & \frac{dg(y,z)}{dz} - \lambda \end{pmatrix}$$

$$\det(M) = 0 \to \lambda$$