

СОЛИТОНЫ В АНГАРМОНИЧЕСКОЙ ЦЕПОЧКЕ МОДЕЛИ ФРЕНКЕЛЯ – КОНТОРОВОЙ

С.А.Беклемишев, В.Л.Клочихин

Научно-исследовательский физико-химический институт им. Л.Я.Карпова

103064 Москва, Россия

Поступила в редакцию 13 апреля 1994 г.

После переработки 8 июня 1994 г.

Получены решения уравнения движения для модели Френкеля–Конторовой с учетом ангармонизма атом-атомного взаимодействия. Найдены поправки к известным решениям в гармоническом приближении, предел возможной скорости солитона растяжения, при котором его энергия не бесконечна, и новые решения, обусловленные учетом ангармонизма, в том числе солитон с топологическим зарядом, равным двум.

Простейшая одномерная модель цепочки в периодическом потенциале предложена Френкелем и Конторовой [1] для описания структуры дислокаций. Дальнейшие обобщения этой модели для различных периодических потенциалов, например потенциала ϕ^4 [2], применяются при исследовании структурных фазовых переходов в сегнетоэлектриках, вызванных смещениями равновесных положений атомов, или при обсуждении подвижности протонов в цепочках водородных связей в некоторых макромолекулах, биологических мембранах и льде, а также в других приложениях. В настоящее время для исследования цепочек водородных связей плодотворно используется не потенциал ϕ^4 , а дважды периодический гармонический потенциал [3]. Задача сводится [4] к решению известного двойного уравнения Синус-Гордона (ДСГ) со знаком минус [5], а модель становится близка к первоначальной модели Френкеля–Конторовой, вмещающей в себя черты модели ϕ^4 .

Традиционное предположение о линейном характере атом-атомного взаимодействия для модели такого типа [6, 7] в работе [2] авторы оправдывали отсутствием аналитического вида решений для модели Френкеля–Конторовой с ангармонической связью между ближайшими соседями, кроме известных [8] частных решений для специального типа квартетного ангармонизма и решения с фиксированными параметрами для случая кубического ангармонизма. Численное исследование [2] с варьированием параметров решения последнего типа показало недостаточность этого решения для изучения ангармонической цепочки в данной модели. Исследования малых ангармонических поправок к известным решениям модели Френкеля–Конторовой в [9, 10] также не дали новых типов решений.

Предположение об ангармоническом характере атом-атомного взаимодействия является существенно более реалистичным, а наличие точки перегиба ангармонического атом-атомного потенциала цепочки приводит к появлению новых решений в изучаемой модели [11, 12]. В нашей работе будут получены как поправки, так и новые решения в этой модели, обусловленные ангармонизмом цепочки.

В модели Френкеля–Конторовой рассматривается одномерная цепочка, состоящая из связанных пружинками частиц массы m , помещенная в периодический потенциал g с периодом h . Найдём решения в виде бегущих волн

координатой $(x - v\tau)$, x – лагранжева координата, v – скорость волны, τ – время. Гамильтониан H такой системы в континуальном приближении, про- нормированный на величину произведения константы жесткости f межатомной связи в цепочке на квадрат ее периода h , есть

$$H = \int_{-\infty}^{\infty} (\nu(y'(n))^2/2 + g(y(n)) + u(r(n)))dn, \quad (1)$$

где $\nu = v^2/c^2$, $c^2 = h^2 f/m$ – квадрат скорости звука в цепочке, $y(n)$ – величина смещения n -го атома цепочки из n -го минимума периодического потенциаль- ного рельефа $g(y)$, отнесенная к величине h , $r(n)$ – деформация n -ой связи. Внешний гармонический потенциал $g(y)$ может быть выбран в обычном [1, 6] виде: $g(y) = a(1 - \cos(2\pi y))/2\pi$. где a – его безразмерная амплитуда. Штрих означает производную по непрерывной в континуальном пределе переменной n . Потенциал атом-атомного взаимодействия в цепочке выберем в виде

$$u(r) = r^2/2 - \gamma r^3/3, \quad (2)$$

где γ – безразмерная постоянная ангармонизма.

Из гамильтониана (1) получим уравнение движения:

$$\beta y'' = dg(y)/dy + 2\gamma y' y'', \quad (3)$$

где $\beta = 1 - \nu$. Оно имеет следующие три ветви решений:

$$3ky' = \begin{cases} 1 - \sqrt{3} \sin(s) - \cos(s), & 3ky' < 0, & (4a) \\ 1 + \sqrt{3} \sin(s) - \cos(s), & 0 < 3ky' < 2, & (4б) \\ 1 + 2\cos(s), & 3ky' > 2, & (4в) \end{cases}$$

где $s = \arccos(1 - q)/3$, $k = 4\gamma/(3\beta)$, $q = 81k^3(E + g(y))/(4\gamma)$, E – константа инте- грирования. При значениях аргумента $|1 - q| > 1$ формулы (4а), (4в) следует понимать в смысле аналитического продолжения функции $\arccos(1 - q)$, где эти формулы будут действительными и будут иметь вид формулы Кардано. Третья ветвь решений (4в), обусловленная ангармонизмом атом-атомного взаимодей- ствия, отвечает закритическим деформациям, которые ранее аналитически не исследовались. Новые типы решений, которые будут получены ниже, обязаны своим существованием данной ветви.

Рассмотрим волны с $\nu < 1$. В зависимости от знака параметра

$$\epsilon = \pi\beta^3/24\gamma^2 a - 1 \quad (5)$$

фазовый портрет модели, описываемой уравнениями (4), различен (см. рис.1– 3, соответственно для $\epsilon > 0$, $\epsilon = 0$, $\epsilon < 0$). Различные типы фазовых траекторий разделены сепаратрисами (жирные кривые на рис.1–3), отвечающими значе- ниям константы интегрирования $E = 0$ (кривая 1 на рис. 1,3) и $E = a\epsilon/\pi$ (кривая 2 на рис.1,3). При $\epsilon = 0$ все сепаратрисы отвечают одному значению константы интегрирования $E = a\epsilon/\pi = 0$ и сливаются (кривые 1–3 на рис.2).

На известные ранее решения 1, 3 (рис.1) и 4, 5 (рис.1–3), существующие в модели Френкеля- Конторовой [1, 6, 7], влияет ангармонизм. При $3ky' \ll 1$ из (4) следует

$$y' = \pm(2(E + g)/\beta)^{1/2} + 3k^2(E + g)/4\gamma, \quad (6)$$

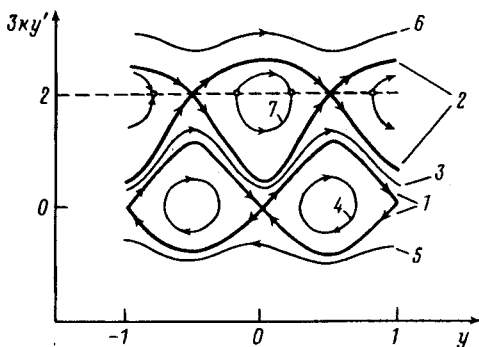


Рис. 1

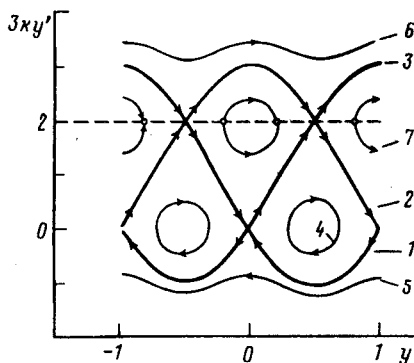


Рис. 2

Рис. 1. Фазовые траектории при $\epsilon > 0$: 1 - $E = 0$, 2 - $E = a\epsilon/\pi$, 3 - $0 < E < a\epsilon/\pi$ - растяжение, 4 - $-a/\pi < E < 0$, 5 - $0 < E < \infty$ - сжатие, 6 - $-\infty < E < a\epsilon/\pi$ - закритическое сжатие, 7 - $a\epsilon/\pi < E < \beta^3/24\gamma^2$

Рис. 2. Фазовые траектории при $\epsilon = 0$: 1, 2, 3 - $E \equiv a\epsilon/\pi = 0$ - сепаратрисы, 4 - $-a/\pi < E < 0$, 5 - $0 < E < \infty$ - сжатие, 6 - $-\infty < E < 0$ - закритическое растяжение, 7 - $0 < E < \beta^3/24\gamma^2$

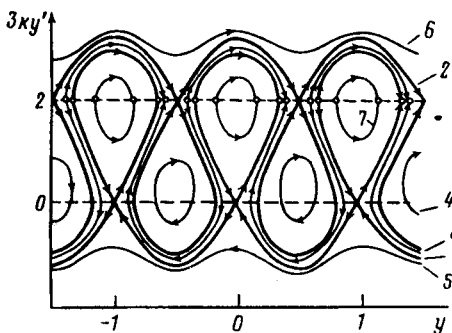


Рис. 3. Фазовые траектории при $\epsilon < 0$: 1 - $E = 0$, 2 - $E = a\epsilon/\pi$, 3 - $-a\epsilon/\pi < E < 0$, 4 - $-a/\pi < E < a\epsilon/\pi$, 5 - $0 < E < \infty$ - сжатие, 6 - $-\infty < E < a\epsilon/\pi$ - закритическое растяжение, 7 - $0 < E < \beta^3/24\gamma^2$

где знак плюс отвечает растяжению, а минус - сжатию. Учет первого слагаемого даст профиль волны в модели Френкеля-Конторовой. Второе слагаемое является ангармонической поправкой. Оно пропорционально константе γ . Знак поправки зависит от того, дозвуковые ($\nu < 1$) или сверхзвуковые ($\nu > 1$) волны рассматриваются. Из (6) следует, что для дозвуковых волн (в том числе статических) участки растяжения цепочки (где $y' > 0$) под влиянием ангармонизма укорачиваются. Участки сжатия ($y' < 0$) удлиняются. Для сверхзвуковых волн влияние ангармонизма противоположное.

Физический смысл ангармонических поправок в следующем. Если в измеримой системе возникает дефект с исчезновением одного атома, то ангармоническая цепочка, становясь мягче в растянутом состоянии, на меньшей длине цепи придет в соответствие с подложкой, чем гармоническая. И наоборот, добавление атома в более жесткую при сжатии ангармоническую цепочку приводит к более протяженному, чем в гармоническом случае, распределению области сжатия по длине цепи. Размер области сжатия или растяжения характеризуется шириной соответствующего кинка или топологического солитона данной модели.

При $E = a\epsilon/\pi > 0$ фазовые траектории до- и закритического растяжения в точках $y = \pm 1/2, \pm 3/2, \dots$, $3ky' = 2$ соединяются, образуя сепаратрисы 2, состоящие из решений (4б) и (4в). Они отличаются удвоенным периодом по сравнению с обычным для модели Френкеля–Конторовой периодом незамкнутой фазовой траектории (кривая 3 рис.1). Сепаратрисы 2 и 1 на рис.1 при $\epsilon \rightarrow 0$, сливаясь, образуют сепаратрисы 1–3 на рис.2, которые при $3ky' > 0$ описывают кинк с топологическим зарядом (суммарным смещением y по длине цепочки), равным двум (сепаратриса 2 от $y = -1$ до $y = 1$, рис.2). Скорость солитона растяжения, описываемого сепаратрисой рис.2 при $E = a\epsilon/\pi = 0$, максимальна и равна:

$$v_c = c(1 - (24a\gamma^2/\pi)^{1/3})^{1/2}. \quad (7)$$

При $E = a\epsilon/\pi > 0$ (рис.1) каждая сепаратриса 2 описывает решетку солитонов со скоростью $v < v_c$. Так, если речь идет о солитонном механизме переноса протонов в цепочке водородных связей [4], то надо учесть ограничение возможной скорости переноса предельной величиной v_c , при которой энергия солитона не бесконечна, как было известно ранее. При этом в модели [4], идеализированной до дефектов только одного типа, в предельном случае величина переносимого электрического заряда может удваиваться соответственно топологическому заряду, равному двум.

При описании солитона в системе с критическими значениями параметров ($\epsilon = 0$; рис.2) уравнения (4) для сепаратрис упрощаются:

$$3ky' = 1 + 2\cos(2\pi(y + j)/3), \quad j = +1, 0, -1. \quad (8)$$

Выражения (8) описывают сепаратрисы 1,2,3 рис.2, соответственно. Из них следует выражение для профиля соответствующего критического кинка растяжения с топологическим зарядом, равным двум:

$$y = (3/\pi)\operatorname{arctg}(\sqrt{3}\operatorname{th}(n\pi/2L)), \quad (9)$$

а при $3ky' < 0$ сепаратрисы 1,2,3 рис.2 описывают антикинк сжатия, для которого данная величина скорости не является критической:

$$y = (3/\pi)\operatorname{arccctg}((2\exp(n\pi/L) + 1)/\sqrt{3}), \quad (10)$$

где величина $L = (\beta_c\pi/2a)^{1/2} = (\sqrt{3}\gamma\pi/a)^{1/3}$ формально равна ширине солитона в модели Френкеля–Конторовой [1] с критическим параметром $\beta_c \equiv \beta(v_c) = (24a\gamma^2/\pi)^{1/3}$.

При $\epsilon < 0$ (рис.3) сепаратриса 2 отделяет замкнутую 4 ($-a/\pi < E < a\epsilon/\pi$) и незамкнутую 6 ($-\infty < E < a\epsilon/\pi$) непрерывные траектории от траекторий 1,3,7 с разрывом в критической точке ($3ky' = 2$). Сепаратриса 2 отвечает бегущей волне, в которой при чередовании сжатия и растяжения смещение растяжения нарастает.

Циклическое движение по траекториям 7 (рис.1,2) и 1,3,7 (рис.3) невозможно (допустимое направление движения обозначено стрелками на фазовых траекториях), и им не соответствует какая-либо конфигурация цепочки в континуальном приближении.

Таким образом, основные результаты работы следующие. Во-первых, возможная скорость солитона растяжения ограничена предельной величиной, при которой его энергия не бесконечна (как полагалось ранее), что существенно,

например, для объяснения подвижности ионов при протонной проводимости. Во-вторых, среди новых решений, обусловленных учетом ангармонизма, найден солитон с топологическим зарядом, равным двум. Это неизвестное ранее решение, являющееся 4π -импульсом не для двойного уравнения СГ [5], а для обычной модели Френкеля–Конторовой с ангармонической цепочкой. Следовательно, не только выбор потенциала подложки в данной модели [3, 4], но и межатомный ангармонизм может являться причиной возникновения новых типов решений.

-
1. Я.И.Френкель, Т.А.Конторова, ЖЭТФ **8**, 89 (1938).
 2. St.Pnevmatikos, N.Flytzanis, and A.R.Bishop, J. Phys. C **20**, 2829 (1987).
 3. St.Pnevmatikos, Phys. Rev. Lett. **60**, 1534 (1988).
 4. St.Pnevmatikos, A.V.Savin, I.Stylianou et al., Physica D**51**, 316 (1991).
 5. P.W.Kitchenside, P.J.Caudrey, and R.K.Bullough, Physica Scripta, **20**, 673 (1979).
 6. F.C.Frank and J.H.Van der Merwe, Proc. Roy. Soc. A **198**, 205 (1949).
 7. P.Bak, Reports on Progress in Physics **45**, 589 (1982).
 8. A.M.Kosevich and A.S.Kovalev, Solid State Commun. **12**, 763 (1973).
 9. S.Marianer, A.R.Bishop, and J.Pouget, Competing interact. and Microstruct. (Statics and Dynamics: Proc. CMS Workshop. LosAlamos, N.M. May 5-8 1987 - Berlin ect.) **27**, 104 (1988).
 10. В.Л.Гиляров, ФТТ **29**, 1055 (1987).
 11. А.И.Мелькер, С.В.Говоров, ФТТ **30**, 3597 (1988).
 12. A.Milchev, Physica D **41**, 262 (1990).