

УДК 538.913

© 1993

УСТОЙЧИВОСТЬ ВЫСОКОЧАСТОТНЫХ САМОЛОКАЛИЗОВАННЫХ КОЛЕБАНИЙ В УПРУГИХ АНГАРМОНИЧЕСКИХ ЦЕПОЧКАХ

А. С. Ковалев, О. В. Усатенко, О. А. Чубыкало

Аналитически изучена устойчивость высокочастотных самолокализованных колебаний различной симметрии в одномерной ангармонической цепочке атомов при «жестком» характере нелинейного взаимодействия ближайших соседей. Показано, что в высокочастотном пределе симметричная мода Такени и Сиверса является неустойчивой, а антисимметричная мода Пейджа устойчива. Обсуждается также длинноволновой аналог самолокализованных ангармонических колебаний разной симметрии.

Впервые нелинейные самолокализованные колебания с частотами выше верхнего края спектра линейных волн для ангармонических цепочек с «жесткой» нелинейностью были рассмотрены в работе [1]. В ней такие возбуждения изучались асимптотическим методом при слабом отщеплении частоты локальных колебаний от максимальной частоты спектра линейных колебаний. Позднее в работе [2] подобные локализованные колебания были исследованы при произвольных частотах в рамках простой модельной системы с распределенными параметрами, а их аналог в конечномерных системах — в работах [2, 3]. В это же время аналогичные самолокализованные колебания ангармонической цепочки были рассмотрены в серии работ [4, 5] в высокочастотном пределе в дискретном подходе. Подобные возбуждения изучались численно в работах [6, 7], где впервые было показано, что решения, найденные в [4, 5], являются высокочастотным пределом локализованных ангармонических колебаний солитонного вида, которые при понижении частоты до верхнего края линейного спектра переходят в стандартные малоамплитудные бионы типа рассмотренных в работе [1]. Позже в работе [8] были предложены локальные ангармонические колебания, отличающиеся симметрией от таковых из работы [4]. При этом возник естественный вопрос об относительной устойчивости тех или иных решений. На этот вопрос в работах [9, 10] получены противоречивые ответы: в [9] со ссылкой на численный счет содержится утверждение о возникновении симметричной локализованной моды типа предложенной в [4], а в [10] при численном расчете наблюдается антисимметричная мода, рассмотренная в [8].

В данной работе мы аналитически исследуем вопрос об устойчивости локальных мод разной симметрии, численно проверяем приближенные аналитические результаты, приведенные в [4, 5], и обсуждаем длинноволновой аналог самолокализованных ангармонических колебаний разной симметрии.

1. Ангармонические цепочки и самолокализованные колебания в них

Рассмотрим простейшую одномерную модель ангармонического кристалла с четверными ангармонизмами, в которой потенциальная энергия межчастичного взаимодействия ближайших атомов имеет следующий вид:

$$U = K_2/2 \sum_n (u_{n+1} - u_n)^2 + K_4/4 \sum_n (u_{n+1} - u_n)^4, \quad (1)$$

где u_n — смещение n -го атома, а K_2 и K_4 — линейная и нелинейная упругие константы.

При этом уравнение движения n -го атома имеет вид

$$m \frac{d^2 u_n}{dt^2} + K_2 (2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}) + K_4 [(u_n - u_{n+1})^3 (u_n - u_{n-1})^3] = 0. \quad (2)$$

В гармоническом пределе закон дисперсии линейных волн типа $u_n = u_n^0 \sin(kna - \omega t)$ имеет акустический характер $\omega = \omega_0(k) = (2S/a) \sin(ka/2)$ со скоростью звука $S = \sqrt{K_2/ma}$ и максимальной частотой $\omega_m = (2S/a)$ при $k = \pi/a$. Вид нелинейных стационарных волн существенно зависит от соотношения знака дисперсии линейных волн

$$D = \left. \frac{d^2 \omega}{dk^2} \right|_{u_n^0 \rightarrow 0}$$

и знака нелинейности (знака K_4). В рассматриваемом случае $D < 0$ и пространственно-локализованные нелинейные колебания существуют лишь в случае «жесткой» нелинейности ($K_4 > 0$). (В противоположном случае «мягкой» нелинейности с $K_4 < 0$ могут существовать «темные» солитоны, рассмотренные ранее в работе [2]). При $K_4 > 0$ локализованные ангармонические колебания существуют в области частот над законом дисперсии линейных волн $\omega_0(k)$. Т. е. в простейшем случае неподвижного центра тяжести локализованного возбуждения (при $k = \pi/a$) $\omega > \omega_m$.

Поскольку при этом колебания соседних атомов близки к противофазным, удобно ввести новые переменные $v_n = (-1)^n \sqrt{K_2/K_4} v_n$, в терминах которых уравнения (2) принимают вид

$$(4/\omega_m^2) \frac{d^2 v_n}{dt^2} + 2v_n + v_{n+1} + v_{n-1} (v_n + v_{n+1})^3 + (v_n + v_{n-1})^3 = 0. \quad (3)$$

При слабом отщеплении частот нелинейных колебаний от верхней границы линейного спектра $\omega^2 - \omega_m^2 < \omega_m^2$ амплитуды колебаний соседних атомов слабо отличаются и возможно длинноволновое описание. Вводя непрерывную координату $an \rightarrow x$ и переходя от конечных разностей к пространственным производным $v_{n\pm 1} \cong v(x) \pm v_x a + v_{xx} a^2/2 \pm \dots$, получаем в основном приближении нелинейное дифференциальное уравнение в частных производных с эвклидовой дифференциальной частью

$$(1/\omega_m^2) v_{tt} + (a^2/4) v_{xx} + v + 4v^3 = 0. \quad (4)$$

Самолокализованное решение этого уравнения можно найти асимптотическим методом [1] в виде двойного ряда

$$v = \sum_{s=0}^{\infty} \sum_{p=0}^{\infty} A_{sp}(\varepsilon x) \varepsilon^{2s+2p+1} \sin\{(2s+1)\omega t\}, \quad (5)$$

где малый параметр разложения $\varepsilon = \sqrt{\omega^2/\omega_m^2 - 1} \ll 1$. В работе [11] методами качественного анализа динамических систем показано, что разложение (5) сходится к истинному решению уравнения (4).

С точностью до ε^3 искомое локализованное решение имеет следующий вид:

$$v \cong \sqrt{2/3} \frac{\varepsilon}{\operatorname{ch} \kappa x} \left\{ \left[1 + \varepsilon^2/18 \left(-1 + \frac{1}{2 \operatorname{ch}^2 \kappa x} \right) \right] \sin \omega t - \frac{\varepsilon^2}{12 \operatorname{ch}^2 \kappa x} \sin 3\omega t \right\}, \quad (6)$$

где $\kappa = 2\varepsilon/a$. Это типичное выражение для динамических солитонов огибающей, в которых ширина области пространственной локализации обратно пропорциональна амплитуде $\Delta \sim a/2\varepsilon \gg a$. В квазиклассическом подходе рассматриваемое решение можно интерпретировать как связанное состояние противофазных высокочастотных фононов.

Если обычным образом через адиабатический инвариант [3] ввести число таких квазичастиц N , то с указанной точностью выражения для полной энергии солитона E и числа фононов в солитоне N имеют вид

$$E = (4K_2^2/3K_4) \varepsilon (1 + 16\varepsilon^2/27), \quad N = (4K_2^2/3K_4\omega_m) \varepsilon (1 + 23\varepsilon^2/54). \quad (7)$$

Из этих формул вытекает следующая зависимость $E = E(N)$:

$$E = \omega_m N + \frac{3}{32} (K_4/K_2)^2 (\omega_m N)^3, \quad (8)$$

из которой следует стандартное для теории солитонов соотношение $dE/dN = \omega(N)$.

Солитонное решение в виде (6) существует лишь при малых значениях ε . С ростом частоты длинноволновое описание теряет смысл. При частоте $\omega = \omega_m \sqrt{5/2}$ ширина солитона сравнивается с межатомным расстоянием, а при частоте $\omega = \omega_m \sqrt{1 + 3K_4 a^2 / 2K_2}$ с межатомным расстоянием сравнивается амплитуда колебаний. Тем не менее численный счет в [6, 7] показал, что на малых временах частота малоамплитудных колебаний возрастает и область локализации сужается. Этот процесс продолжается до тех пор, пока возбуждение не локализуется фактически на нескольких частицах. Такой предел был исследован в работах [4, 5, 8]. Здесь вновь необходимо вернуться к исходным дискретным уравнениям (3). По-видимому, они не имеют стационарных монохроматических решений, о чем говорит развал высокочастотных локальных колебаний на малоамплитудные движущиеся солитоны огибающей при численном счете в работах [6, 7]. Формально можно искать стационарные состояния в виде ряда

$$v_n = \sum_{s=0}^{\infty} v_{ns} \sin \{(2s+1)\omega t\},$$

но в этом разложении нет истинного малого параметра и амплитуды гармоник убывают численно как $(2s+1)^{-2}$. При этом возникает отдельная задача о сходимости этого ряда. Тем не менее, оставляя в стороне все эти вопросы, обычно изучают первый шаг этой процедуры, сводящийся к так называемому «резонансному приближению». В нем приближенное решение ищется в виде $v_n \cong 2\sqrt{3} z_n \sin \omega t$ и отбрасываются все высшие гармоники. При этом возникает бесконечная система нелинейных алгебраических уравнений

$$(2\omega/\omega_m)^2 z_n = (z_n + z_{n+1}) + (z_n + z_{n-1}) + (z_n + z_{n+1})^3 (z_n + z_{n-1})^3. \quad (9)$$

Эта система легко решается в высокочастотном пределе, где можно воспользоваться малостью параметра $\mu = 1/\varepsilon$. Поскольку амплитуда колебания пропорциональна ε , то удобно ввести новые обозначения: $z_n = \varepsilon w_n$. Вид решения существенно зависит от предположения о его симметрии. В работах [4, 5, 9] была рассмотрена симметричная мода, в которой центр колебания лежит на частице (например, с номером n) и $w_n = w_{-n}$. Для этой моды, которую можно представить графически в виде $(\dots \downarrow \uparrow \downarrow \dots)$, уравнения (9) сводятся к виду

$$2w_0 - (w_0 + w_1)^3 + \mu^2 (w_0 - w_1) = 0,$$

$$4w_1 - (w_1 + w_0)^3 - (w_1 + w_2)^3 + \mu^2 (2w_1 - w_0 - w_2) = 0,$$

.....

$$4w_n - (w_n + w_{n-1})^3 - (w_n + w_{n+1})^3 + \mu^2 (2w_n - w_{n-1} - w_{n+1}) = 0,$$

.....

Отбрасывая слагаемые $\sim \mu^2$ и считая во втором уравнении $w_2 \cong 0$, легко находим из первых двух уравнений $w_0 \cong 0.756\ 717$, $w_1 \cong 0.391\ 404$, (в обозначениях работ [4, 5], отличающихся от данных множителем $3\sqrt{3}/4$, это соответствует 1 и 1/2). Из следующих уравнений в системе (10) находятся остальные амплитуды: $w_2 \cong 0.01499$, $w_3 \cong 8.28 \cdot 10^{-7}$ и т. д. Их величина быстро убывает с номером n : $w_n \cong 2 (w_0/4)^{3^{n-1}}$ (в работах [4, 9] неправильно указывается на экспоненциальное убывание амплитуды с номером n). Видно, что в высокочастотном самолокализованном колебании участвуют практически только три центральные частицы и отношение $w_2/w_0 \cong 0.02$.

В работе [8] предложено другое, антисимметричное, высокочастотное решение, центр которого лежит между частицами (например, с номерами 0 и -1) и в котором $u_0 = -u_{-1}$, $u_1 = -u_{-2}$, ... Для такой моды, которую можно представить графически в виде $(\dots \uparrow \downarrow \dots)$, в системе уравнений (10) первое уравнение изменится и примет вид

$$4w_0 - 8w_0^3 - (w_0 + w_1)^3 + \mu^2 (w_0 - w_1) = 0. \quad (11)$$

В том же приближении, которое использовалось выше, амплитуды колебаний центральных атомов теперь такие: $w_0 \cong 0.645\ 518$, $w_1 \cong 0.106\ 719$, $w_2 \cong 3 \cdot 10^{-4}$, $w_3 \cong 7 \cdot 10^{-12}$ Наблюдается такое же быстрое убывание амплитуды колебаний с номером n : $w_n \cong 2 (w_0/2)^{3^n}$, и колеблются практически два центральных атома.

2. Границы применимости аналитических результатов и «рельеф Пайерлса» для самолокализованных колебаний

Поскольку в работах [4, 5, 8] фактически был рассмотрен предел $\omega \rightarrow \infty$, то прежде всего возникает вопрос о нижней (по частоте) границе применимости такого приближения, соответствующего отбрасыванию в уравнениях (10), (11) слагаемых $\sim \varepsilon^2$. Из физических соображений естественная частотная граница определяется требованием того, чтобы относительные смещения соседних атомов

Таблица 1

Отношение амплитуд колебаний трех центральных атомов при различных значениях параметра

ϵ	w_1/w_0	w_2/w_0
1.346	0.591	0.101
10	0.525	0.025
∞	0.517	0.0198

в центре возбуждения не превышали межатомного расстояния: $u_0 - u_1 \leq a$ или $w_0 + w_1 \leq \sqrt{3}/2 \sqrt{K_4 a^2 / K_2 \epsilon^{-1}}$. Если для оценки взять найденные значения w_0 и w_1 , то получаем соотношение $\epsilon \leq 0.77 \sqrt{a^2 K_4 / K_2}$. В общем случае естественно предположить, что $K_4 \sim K_2 / a^2$ и максимально возможные частоты должны быть порядка величины ω_m (т. е.

$\epsilon \leq 1$). И только при аномально больших значениях ангармонической константы $K_4 \gg K_2 / a^2$ имеет смысл рассматривать область больших частот $\omega \gg \omega_m$ ($\epsilon \gg 1$) в рамках предложенной модели. Мы рассмотрели численно систему (10) для двух различных значений ϵ : при $\epsilon = 1.346$ (чему отвечает $\mu = 0.743$ или $\omega \cong \omega_m \cdot 1.677$) и $\epsilon = 10$ ($\mu = 0.1$ и $\omega \cong 10\omega_m$). Задавая значения w_0 и решая численно цепочку зацепляющихся уравнений (10), мы выходим в общем случае на пространственно-периодические решения двух типов — знакопостоянные и знакопеременные. Сужая вилку значений w_0 , выводящих на решения разного типа, находим единственное значение w_0 , соответствующее монотонно убывающему солитонному решению.

В табл. 1 для двух указанных значений ϵ приведены отношения амплитуд пяти центральных осцилляторов, вычисленные численно, и соответствующие величины, полученные аналитически в пределе $\omega \rightarrow \infty$. Как видно, при $\epsilon \sim 1$ (т. е. при граничных частотах для $K_4 \sim K_2 / a^2$) данные численного и аналитического расчетов расходятся довольно существенно уже для w_2 . Согласие становится достаточно хорошим лишь при $\epsilon \sim 10$, т. е. при частотах, которые имеет смысл рассматривать только в случае $a^2 K_4 / K_2 \sim 10^2$.

Второй вопрос, возникающий при изучении самолокализованных колебаний с разными частотами, заключается в следующем: что в длинноволновом пределе малоамплитудных солитонов с $\omega \cong \omega_m$ соответствует высокочастотным колебаниям ($\omega \gg \omega_m$) двух рассмотренных типов с разной симметрией? Для ответа на него необходим учет дискретности в длинноволновом приближении. В решении (б) для малоамплитудного солитона аргумент x можно заменить на $x - x_0$ с произвольной константой x_0 , описывающей положение центра тяжести солитона, и от x_0 не зависит полная энергия солитона E . Выражение для E , согласующееся с динамическим уравнением для функции $v(x, t)$, имеет вид

$$E = 4K_2^2 / aK_4 \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left\{ v_t^2 / 2\omega_m^2 - a^2 v_x^2 / 8 + v^2 / 2 + v^4 \right\}. \quad (12)$$

В основном по малому параметру ϵ приближении это выражение сводится к следующему:

$$E = (2K_2^2 / aK_4) \int dx A_{00}^2 [\epsilon (x - x_0)].$$

Простейший учет дискретности заключается в переходе от интегрирования в энергии к суммированию по узлам решетки при сохранении функционального вида решения для v , полученного в рамках дифференциального уравнения (4)

$$E = (2K_2^2/K_4) \sum_{n=-\infty}^{+\infty} (2\varepsilon^2/3) \operatorname{sch}^2 \kappa (an - x_0). \quad (13)$$

При этом энергия становится функцией координаты центра солитона x_0 : $E = E(x_0)$. Впервые этот метод был предложен Инденбомом [12] для нахождения рельефа Пайерлса при движении дислокации. В данном случае мы можем говорить об аналоге рельефа Пайерлса для самолокализованного колебания (солитона огибающей). Воспользовавшись формулой суммирования Пуассона, легко вычислить сумму в (13) и получить в основном приближении зависящую от x_0 добавку к выражению для энергии (7)

$$E = (4K_2^2/K_4) \{ \varepsilon + 2\pi^2 \exp(-\pi^2/2\varepsilon) \cos(2\pi x_0/a) \}. \quad (14)$$

Энергия $E(x_0)$ периодична по x_0 с периодом a и обладает двумя экстремумами, соответствующими двум стационарным состояниям. Одно из этих состояний с $x_0 = 0$ описывает солитон с центром тяжести, лежащим на атоме, и является длинноволновым аналогом симметричной высокочастотной моды, изученной в [4, 5]. Этому состоянию отвечает максимум энергии. Второе стационарное состояние с $x_0 = a/2$ описывает солитон с центром между частицами и представляет собой длинноволновый предел антифазной высокочастотной моды, предложенной в [8]. Ему соответствует минимум энергии. Сравнение энергии двух решений является наводящим соображением в пользу устойчивости антисимметричной моды, хотя и не является прямым доказательством этого утверждения.

Рассмотрим вопрос об устойчивости высокочастотных локальных мод разной симметрии подробнее.

3. Устойчивость высокочастотных самолокализованных колебаний

Исследование устойчивости локальных мод разной симметрии в высокочастотном пределе облегчается благодаря тому, что колеблются практически лишь три (в симметричной моде) или четыре (в антисимметричной) частицы. Поэтому вместо рассмотрения бесконечной ангармонической цепочки можно ограничиться изучением цепочки конечной длины. Мы ограничились взаимодействующими по закону (1) замкнутыми в кольцо четырьмя частицами. В такой системе симметричную и антисимметричную моды можно условно изобразить в следующем виде: $(\cdot \downarrow \uparrow \downarrow)$ и $(\cdot \uparrow \downarrow \cdot)$.

В табл. 2 приведены результаты аналитического расчета для отношения амплитуд в указанных двух колебаниях для конечномерной системы четырех осцилляторов и для бесконечной цепочки в пределе $\omega \gg \omega_m$. Видно достаточно хорошее совпадение результатов. Это позволяет надеяться, что анализ устойчивости колебаний в цепочке из четырех осцилляторов дает ответ на вопрос об устойчивости и в случае бесконечной цепочки.

Для замкнутой цепочки удобно ввести относительные смещения $p_n = \sqrt{K_4/K_2} (u_n - u_{n+1})$, где $n = 1, 2, 3, 4$ и $p_5 = p_1$. В этих терминах динамические уравнения имеют вид

$$(4/\omega_m^2) d^2 p_n / dt^2 + 2p_n - p_{n-1} - p_{n+1} + 2p_n^3 - p_{n-1}^3 - p_{n+1}^3 = 0. \quad (15)$$

Для стационарных состояний в резонансном приближении, как и выше, можно записать $p_n = (2\sqrt{3})\Phi_n \sin \omega t$ и получить четыре алгебраических уравнения для амплитуд Φ_n

$$\begin{aligned} 2(\Omega - 1)\Phi_n + \Phi_{n+1} + \Phi_{n-1} - \\ 2\Phi_n^3 + \Phi_{n+1}^3 + \Phi_{n-1}^3 = 0, \quad (16) \end{aligned}$$

где $\Omega = 2\omega^2/\omega_m^2$. Учитывая условие $\sum_n \Phi_n = 0$, легко найти все решения системы уравнений (16). Общее число решений равно пяти, и они имеют следующий вид:

$$\text{a) } \Phi_1 = \Phi_2 = -\Phi_3 = -\Phi_4 = \sqrt{\Omega - 1},$$

$$u_2 = u_4 = 0, \quad u_1 = -u_3 = 2\sqrt{3}\sqrt{K_4/K_2}\sqrt{2\omega^2/\omega_m^2 - 1} \quad (\uparrow \cdot \downarrow \cdot), \quad (17)$$

$$\text{b) } \Phi_1 = \Phi_3 = 0, \quad \Phi_2 = -\Phi_4 = \sqrt{\Omega - 1},$$

$$u_1 = u_2 = -u_3 = -u_4 = 2\sqrt{3}\sqrt{K_4/K_2}\frac{1}{2}\sqrt{2\omega^2/\omega_m^2 - 1} \quad (\uparrow \uparrow \downarrow \downarrow), \quad (18)$$

$$\text{c) } \Phi_1 = -\Phi_2 = \Phi_3 = -\Phi_4 = \sqrt{\Omega/2 - 1},$$

$$u_1 = -u_2 = u_3 = -u_4 = 2\sqrt{3}\sqrt{K_4/K_2}\frac{1}{2}\sqrt{\omega^2/\omega_m^2 - 1} \quad (\uparrow \downarrow \uparrow \downarrow), \quad (19)$$

$$\text{d) } \Phi_1 = -\Phi_2, \quad \Phi_3 = -\Phi_4, \quad \Phi_{1,3} = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left\{ (3\Omega - 4) \pm [(\Omega - 4)(5\Omega - 4)]^{1/2} \right\}^{1/2},$$

$$u_1 = u_3 = 2\sqrt{3}\sqrt{K_4/K_2}(\Phi_1 + \Phi_3)/4, \quad u_2 = 2/\sqrt{3}(\sqrt{K_4/K_2})(-3\Phi_1 + \Phi_3)/4,$$

$$u_4 = 2\sqrt{3}\sqrt{K_4/K_2}(\Phi_1 - 3\Phi_3) \quad (\uparrow \downarrow \uparrow \cdot), \quad (20)$$

$$\text{e) } \Phi_1 = \Phi_3 = -(\Phi_2 + \Phi_4)/2, \quad \Phi_{2,4} = \frac{1}{\sqrt{7}} \left\{ (3\Omega - 5) \pm \right.$$

$$\left. \pm 2 [(\Omega - 4)(2\Omega - 1)]^{1/2} \right\}^{1/2},$$

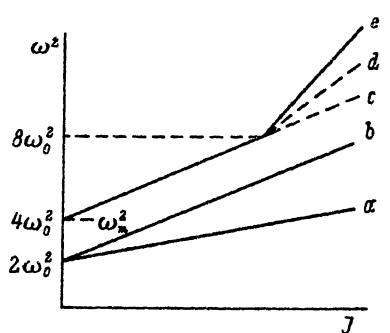
$$u_1 = -u_4 = r_1, \quad u_2 = -u_3 = r_2, \quad r_{1,2} = \pm \frac{2}{\sqrt{3}}\sqrt{K_4/K_2}\Phi_{1,2}/2 \quad (\uparrow \downarrow \uparrow \downarrow). \quad (21)$$

Таблица 2

Отношение амплитуд колебаний центральных частиц для бесконечной цепочки и для системы четырех частиц

	4	∞
$w_1/w_0 _{\text{сим}}$	0.52786	0.51724
$w_2/w_1 _{\text{сим}}$.10557	0.03829
$w_1/w_0 _{\text{ант}}$	5.8284	6.048

Решения а), б), в) соответствуют «главным нелинейным колебаниям», которые допускают предельный переход при $u_n \rightarrow 0$ к линейным колебаниям гармонического спектра. Решения д) и е) существенно нелинейные. Они возникают лишь при превышении уровня возбуждения системы некоторого порогового значения.



Зависимость частоты колебаний от параметра нелинейности J .

Эти решения являются аналогом солитонов в конечномерных нелинейных динамических системах. Из формул (20), (21) видно, что решение d) соответствует симметричной высокочастотной локальной моде из [4, 5], а решение e) — антисимметричной локальной моде из работы [8]. Степень возбуждения системы удобно характеризовать суммарной характеристикой $J = (\omega_m^2/4) \sum_n \Phi_n^2$, являющейся функцией частоты того или иного решения.

Зависимости $J(\omega^2)$ для всех перечисленных решений изображены на рисунке и имеют следующий вид:

$$J_a = 2\omega^2 - \omega_m^2, \quad \omega > \omega_m/\sqrt{2}, \quad (22)$$

$$J_b = \omega^2 - \omega_m^2/2, \quad \omega > \omega_m/\sqrt{2}, \quad (23)$$

$$J_c = \omega^2 - \omega_m^2, \quad \omega > \omega_m, \quad (24)$$

$$J_d = (3\omega^2 - 2\omega_m^2)/4, \quad \omega > \omega_B = \sqrt{2} \omega_m, \quad (25)$$

$$J_e = (5\omega^2 - 3\omega_m^2)/7, \quad \omega > \omega_B. \quad (26)$$

Из рисунка видно, что квазисолитонные решения d) и e) отщепляются от однородного противофазного решения c) бифуркационным образом в точке бифуркации $\omega_B = \sqrt{2} \omega_m$ ($\Omega_B = 4$) и $J_B = \omega_m^2$. При увеличении числа частиц в системе число «главных нелинейных колебаний» (типа a), b), c)) растет, и в линейном пределе они дают сплошной спектр гармонических волн с $0 < \omega < \omega_m$. При этом точка бифуркации смещается влево и $J_B \rightarrow 0$, а квазисолитонные состояния типа d) и e) превращаются в солитоны огибающей бесконечной цепочки [3].

Перейдем к анализу устойчивости найденных решений. Для этого учтем зависящие от времени малые добавки к функциям $p_n(t)$ и представим в резонансном приближении их в виде $p_n = 2\sqrt{3} \Phi_n \sin \omega t + x_n(t)$, где $x_n \ll \Phi_n$. Линеаризуя динамические уравнения относительно малых добавок x_n , получаем для них систему линейных уравнений

$$\begin{aligned} & -4(d^2 x_n / dt^2) / \omega_m^2 + (1 + 2\Phi_{n+1}^2) x_{n+1} + (1 + 2\Phi_{n-1}^2) x_{n-1} - \\ & 2(1 + 2\Phi_n^2) x_n - 2 \cos 2\omega t \Phi_{n+1}^2 x_{n+1} - 2 \cos 2\omega t \Phi_{n-1}^2 x_{n-1} + \\ & + 4 \cos 2\omega t \Phi_n^2 x_n = 0. \end{aligned} \quad (27)$$

Далее в соответствии со стандартной методикой [13] выделяем основную временную зависимость (ωt) в x_n и вводим новые функции времени: $x_n = A_n(t) \cos \omega t + B_n(t) \sin \omega t$. Если представить функции A_n и B_n в виде

$A_n = a_n \exp(-\nu t)$, $B_n = b_n \exp(-\nu t)$, подставить величины x_n в таком виде в уравнение (27) и приравнять нулю коэффициенты при $\cos \omega t$ и $\sin \omega t$, то приходим к системе восьми линейных алгебраических уравнений для a_n и b_n

$$\begin{aligned} -(q + 2\Phi_n^2) a_n + (1 + \Phi_{n+1}^2) a_{n+1} + (1 + \Phi_{n-1}^2) a_{n-1} + \lambda b_n &= 0, \\ -(q + 6\Phi_n^2) b_n + (1 + 3\Phi_{n+1}^2) b_{n+1} + (1 + 3\Phi_{n-1}^2) b_{n-1} - \lambda a_n &= 0, \end{aligned} \quad (28)$$

где $q = 4(\nu^2 - \omega^2)/\omega_m^2 + 2$ и $\lambda = 8\omega\nu/\omega_m^2$. Детерминант этой системы уравнений D представляет собой полином восьмой степени относительно величины ν^2 . Наличие положительных корней $\nu^2 > 0$ уравнения $D(\nu^2, \omega) = 0$ свидетельствует о неустойчивости того или иного решения при заданном значении частоты ω .

Детерминант D легко вычисляется для «главных нелинейных мод». Если ввести обозначение $d = 2\nu/\omega_m$, то для решения а) он равен

$$D_a = \{(q - 2)^2 + \lambda^2\} d^4 \{d^2 + 4(3\Omega - 1)\}^2 \{d^4 + 4d^2(5\Omega - 2) + 4\Omega(5\Omega - 4)\}. \quad (29)$$

При $\Omega > 1$ ($\omega^2 > \omega_m^2$), когда существует это решение, $D_a \neq 0$ и эта мода устойчива.

Для решения типа б) имеем

$$D_b = \{(q - 2)^2 + \lambda^2\} \{q^2 + \lambda^2\} d^2 \{d^2 + 4(3\Omega - 1)\} \{d^4 + 12d^2 + 4(2\Omega - 1)\}, \quad (30)$$

и при $\Omega > 1$ этот детерминант также отличен от нуля и решение устойчиво.

В случае противофазных однородных колебаний с) детерминант D равен

$$D_c = \{(q - 2)^2 + \lambda^2\} d^2 \{d^2 + 12\Omega - 8\} \{d^4 + 4(2\Omega - 1)d^2 + \Omega(\Omega - 4)\}^2. \quad (31)$$

При частотах ниже точки бифуркации $2 < \Omega < \Omega_B = 4$ (Ω_B соответствует частоте бифуркации $\omega_B = \sqrt{2} \omega_m$) детерминант (31) не обращается в нуль и решение устойчиво. Однако выше точки бифуркации угловая скобка в (31) зануляется при положительном значении d^2 и однородные противофазные колебания становятся неустойчивыми.

Наибольший интерес для нас представляют квазисолитонные состояния д) и е). Для симметричной моды д) детерминант D можно свести к виду

$$D = \{(q - 2)^2 + \lambda^2\} \{d^4 + 7\Omega d^2 - 5/16(\Omega - 4)(\Omega - 4/5)\} \tilde{D}, \quad (32)$$

где

$$\tilde{D} = \begin{vmatrix} q + 1 + 9\Phi_1^2 & -1 - 3\Phi_3^2 & \lambda & 0 \\ -1 - 3\Phi_1^2 & q + 1 + 9\Phi_3^2 & 0 & \lambda \\ -\lambda & 0 & q + 1 + 3\Phi_1^2 & -1 - \Phi_3^2 \\ 0 & -\lambda & -1 - \Phi_1^2 & q + 1 + 3\Phi_3^2 \end{vmatrix}. \quad (33)$$

При $\Omega > \Omega_B = 4$ возникает положительный корень $a^2 > 0$ уравнения $D = 0$, связанный с занулением угловой скобки в выражении (32). Таким образом, симметричная локализованная мода неустойчива во всей области ее существования.

Наконец, для антисимметричной локализованной моды е) детерминант сводится к виду

$$\begin{aligned}
 D = & \{(q-2)^2 + \lambda^2\} [d^4 + 4/7d^2(11\Omega + 10) + 20/49(\Omega - 4)(\Omega - 6/5)] \times \\
 & \times \langle d^8 + d^6/7(17\omega - 4) + d^4/49(2320\Omega^2 - 2956\Omega - 624 - 16 \times \\
 & \times (10\Omega + 9)\sqrt{(\Omega - 4)(2\Omega - 1)}) + 32/49d^2(83\Omega^3 - 24\Omega^2 - 537\Omega + \\
 & + 455 + 2(22\Omega^2 + 21\Omega - 9)\sqrt{(\Omega - 4)(2\Omega - 1)}) + 16/49(99\Omega^4 - \\
 & 148\Omega^3 + 158\Omega^2 - 268\Omega + 156) - 64/49(10\Omega^3 - 11\Omega^2 - \\
 & 8\Omega + 9)\sqrt{(\Omega - 4)(2\Omega - 1)} \rangle. \tag{34}
 \end{aligned}$$

В положительности квадратной скобки при $\Omega > \Omega_B$ легко убедиться аналитически. Положительность угловой скобки в (34) доказывалась нами численно, а в пределах $\Omega \rightarrow \Omega_B$ и $\Omega \rightarrow \infty$ аналитически. Итак, антисимметричная мода является устойчивой во всей частотной области ее существования.

На рисунке всем устойчивым решениям соответствуют жирные линии.

При увеличении числа осцилляторов характер решений при $\omega \sim \omega_m$ и их систематика, конечно, претерпевают изменения, однако в высокочастотном пределе $\omega \gg \omega_m$ решения для солитонов огибающей симметричного и антисимметричного типов близки к рассмотренным d) и е) решениям. Поэтому можно сделать вывод о неустойчивости несимметричных нелинейных локальных колебаний, рассмотренных в [4, 5], и об устойчивости самолокализованных высокочастотных решений, предложенных в [8]. Приведенный в [10] график полученных численно амплитуд колебаний атомов в ангармонической решетке, по-видимому, подтверждает этот вывод.

Список литературы

- [1] Косевич А. М., Ковалев А. С. // ЖЭТФ. 1974. Т. 67. № 5(11). С. 1793—1804.
- [2] Ковалев А. С., Богдан М. М. // Физика многочастичных систем. Киев: Наукова думка, 1988. В. 13. С. 20—32.
- [3] Косевич А. М., Ковалев А. С. // Введение в нелинейную физическую механику. Киев: Наукова думка, 1989. 300 с.
- [4] Sievers A. J., Takeno S. // Phys. Rev. Lett. 1988. V. 61. N 8. P. 970—974.
- [5] Takeno S., Kisoda K., Sievers A. J. // Prog. Theor. Phys. Suppl. 1988. N 94. P. 242—269.
- [6] Burlakov V. M., Kiselev S. A., Pyrkov V. N. // Phys. Rev. 1990. V. B42. N 8. P. 4921—4927.
- [7] Бурлаков В. М., Киселев С. А. // ЖЭТФ. 1991. Т. 99. № 5. С. 1526—1538.
- [8] Page J. B., // Phys. Rev. 1990. V. B41. N 11. P. 7835—7838.
- [9] Bickham S. R., Sievers A. J. // Phys. Rev. 1991. V. B. 43. N 3. P. 2339—2345.
- [10] Yoshimura K., Watanabe A. J. // J. Phys. Soc. Japan. 1991. V. 60. N 1. P. 82—87.
- [11] Елеонский В. М., Кулагин Н. Е., Новожилова Н. С., Силин В. П. // Сб. «Методы качественной теории дифференциальных уравнений». Горький, 1982. С. 73—92.
- [12] Косевич А. М. Динамика кристаллической решетки. Харьков: Высшая школа, 1990.
- [13] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая механика. М.: Наука.