НЕЛИНЕЙНЫЕ ВОЛНЫ В АТОМНОЙ ЦЕПОЧКЕ С КУБИЧНЫМ АНГАРМОНИЗМОМ И С ДАЛЬНОДЕЙСТВУЮЩЕЙ ГАРМОНИЧЕСКОЙ ЧАСТЬЮ

Р.Х.Сабиров

Московский педагогический государственный университет
Поступило в Редакцию 22 марта 1994 г.

Исследовано распространение солитонов в атомной цепочке с ангармонизмом 3-го порядка и с дальнодействующей гармонической частью межатомного взаимодействия (гармоническая часть, связанная с взаимодействием ближайших соседей, входит в функцию Гамильтона отдельным слагаемым). Рассмотрены два различных типа дальнодействия. В континуальном пределе получено уравнение для смещения атома из положения равновесия с учетом производных от смещения по переменной x до 5-го порядка включительно. При пренебрежении производными 5-го порядка получены решения типа солитонов, решения типа кноидальных волн отсутствуют. Свойства солитонов существенно зависят от выбора типа дальнодействия. Так, в одном случае существуют лишь дозвуковые солитоны либо сжатия, либо растяжения в зависимости от знака константы ангармонизма. В другом случае существуют сверхзвуковые солитоны, но возможно существование одновременно и дозвуковых солитонов. Здесь возможно одновременное существование и солитонов сжатия, и солитонов растяжения. Под скоростью звука понималось ее значение для гармонической решетки с взаимодействием лишь ближайших атомов. Отметим, что в отсутствие дальнодействия солитоны обладают сверхзвуковыми скоростями.

1. Исследованию распространения нелинейных волн в континуальном приближении в одноатомной цепочке с различными потенциалами взаимодействия атомов посвящено большое число работ [1–7]. Однако, как правило, эти работы выполнены в приближении взаимодействия ближайших атомов. Можно ожидать, что учет дальнодействия может существенно изменить характер распространения нелинейных волн. В [8], например, с учетом взаимодействия первых и вторых соседей показано, что в решетке наряду со сверхзвуковыми солитонами могут существовать и дозвуковые.

В [9] изучено распространение нелинейных волн в атомной цепочке, описываемой гамильтонианом

$$\mathcal{H}=\sum_{n=0}^{N}\frac{p_n^2}{2m}+\sum_{n=1}^{N}\left[\alpha(u_n-u_{n-1})^2+\beta(u_n-u_{n-1})^3\right]+\frac{1}{2}\sum_{m,n}V_{mn}(u_m-u_n)^2, \tag{1}$$

где p_n — импульс n-го атома массой m, u_n — его смещение из положения равновесия, $\alpha/2$ — упругая постоянная, β — константа ангармонизма 3-го порядка, знак которой пока мы не конкретизируем,

V_{mn} — силовые постоянные. Последний член в (1) описывает дальнодействующее взаимодействие в гармоническом приближении. В [9] в соответствии с [10] принято

$$V_{mn} = (-1)^{m+n} k \exp(-\gamma l |m-n|), \tag{2}$$

где k — постоянная взаимодействия, l — равновесное расстояние между атомами, γ^{-1} — параметр, характеризующий размер области взаимодействия атомов. Без потери общности можно считать $V_{mm} = 0$. Запись V_{mn} в виде (2) благодаря множителю $(-1)^{m+n}$ фактически означает, что мы рассматриваем одноатомную цепочку ионного типа.

К сожалению, расчет работы [9] ошибочен. Однако, поскольку сама модель, исследованная в [9], представляет несомненный интерес, желательно провести ее точный анализ. Более того, интерес вызывает случай, когда V_{mn} вместо (2) имеет вид

$$V_{mn} = k \exp(-\gamma l |m-n|). \tag{3}$$

Далее взаимодействия типа (2) и (3) будем рассматривать параллельно.

2. Будем считать, что число атомов в цепочке $N \to \infty$. Согласно (1), уравнение движения n-го атома, далекого от нулевого атома, можно записать в виде

$$m\ddot{u}_n = 2\alpha(\Delta_{n+1} - \Delta_n) + 3\beta\left(\Delta_{n+1}^2 - \Delta_n^2\right) + 2\sum_m V_{mn}(u_m - u_n), \tag{4}$$

где

$$\Delta_{n+1} = u_{n+1} - u_n, \tag{5}$$

а точка над u означает производную по времени t. С учетом (2) и (3) можно показать, что

$$\sum_m V_{m,n+1} u_m + \sum_m V_{m,n-1} u_m = \mp 2\,\mathrm{ch}(\gamma l) \sum_m V_{mn} u_m -$$
$$- k(u_{n+1} + u_{n-1} \pm 2\exp(-\gamma l) u_n) \tag{6}$$

и

$$\sum_n V_{mn} = \mp \frac{2k}{e^{\gamma l} \pm 1}, \qquad \gamma \neq 0. \tag{7}$$

Здесь верхние знаки, как и везде далее, относятся к силовой постоянной (2), а нижние — к (3).

На основе (4) запишем выражение для $m(\ddot{u}_{n+1} + \ddot{u}_{n-1})$. Учитывая (6) и (7), имеем

$$m(\ddot{u}_{n+1} + \ddot{u}_{n-1}) = 2\alpha\Big(\Delta_{n+2} - \Delta_{n+1} + \Delta_n - \Delta_{n-1}\Big) + 3\beta\Big(\Delta_{n+2}^2 - \Delta_{n+1}^2 +$$
$$+ \Delta_n^2 - \Delta_{n-1}^2\Big) - 2k\left[\mathrm{th}\left(\frac{\gamma l}{2}\right)\right]^{\pm 1}(u_{n+1} + u_{n-1}) \mp 4ke^{-\gamma l} u_n \mp 4\,\mathrm{ch}(\gamma l)\sum_m V_{mn} u_m. \tag{8}$$

Окончательно из (4), (7) и (8) можно получить

$$m\left[\ddot u_{n+1}+\ddot u_{n-1}\pm 2\,\mathrm{ch}(\gamma l)\ddot u_n\right]=2\alpha\Big\{\Delta_{n+2}-\Delta_{n+1}+\Delta_n-\Delta_{n-1}\pm$$

$$\pm\left[2\,\mathrm{ch}(\gamma l)\mp\frac{k}{\alpha}(\mathrm{th}(\gamma l/2))^{\pm1}\right](\Delta_{n+1}-\Delta_n)\Big\}+$$

$$+3\beta\left\{\Delta_{n+2}^2-\Delta_{n+1}^2+\Delta_n^2-\Delta_{n-1}^2\pm 2\,\mathrm{ch}(\gamma l)\left(\Delta_{n+1}^2-\Delta_n^2\right)\right\}. \qquad (9)$$

С учетом уравнения (4) для n-го, $n+1$-го и $n-1$-го атомов легко проверить, что формула (9) справедлива и при $k=0$ и при $\gamma\to\infty$, когда дальнодействие исключается из рассмотрения.

3. Перейдем в (9) к континуальному пределу, используя разложение в ряд Тейлора величин $u_{n\pm1}$ и $u_{n\pm2}$ вблизи $u_n = u(x)$, где x — непрерывная переменная:

$$u_{n\pm m}=u\pm u_x(ml)+\frac{1}{2!}u_{xx}(ml)^2\pm\frac{1}{3!}u_{xxx}(ml)^3+\ldots, \qquad (10)$$

где $m = 1, 2$. Здесь u_x — производная от u по x. Ограничимся в (10) учетом производных до 5-го порядка включительно, что соответствует расчету работы [9]. Это даст возможность выявить ошибки, допущенные в [9]. Тогда из (5), (9) и (10) следует

$$m\ddot u+\frac{1}{4}ml^2\mathrm{sech}^2(\gamma l/2)\ddot u_{xx}-2\alpha l^2\left(1-\frac{\alpha_0}{\alpha}\right)u_{xx}-$$

$$-6\beta l^3u_xu_{xx}-\frac{1}{6}\alpha l^4\left(1+3\,\mathrm{sech}^2(\gamma l/2)-\frac{\alpha_0}{\alpha}\right)u_{xxxx}-$$

$$-\frac{1}{2}\beta l^5\left[\left(1+3\,\mathrm{sech}^2(\gamma l/2)\right)(u_xu_{xx})_{xx}-u_{xx}u_{xxx}\right]=0, \qquad (11)$$

где

$$\alpha_0=\frac{k}{4}\,\mathrm{th}(\gamma l/2)\mathrm{sech}^2(\gamma l/2). \qquad (12)$$

Выражение (11) получено для взаимодействия с силовой постоянной (2). Максимальное значение α_0, равное $k/\sqrt{12}$, достигается при $\mathrm{ch}(\gamma l)=2$.

В случае учета выражения (3) уравнение движения имеет вид

$$m\ddot u-\frac{1}{4}ml^2\mathrm{csch}^2(\gamma l/2)\ddot u_{xx}-2\alpha l^2\left(1-\frac{\alpha^*}{\alpha}\right)u_{xx}-$$

$$-6\beta l^3u_xu_{xx}-\frac{1}{6}\alpha l^4\left(1-3\,\mathrm{csch}^2(\gamma l/2)+\frac{\alpha^*}{\alpha}\right)u_{xxxx}-$$

$$-\frac{1}{2}\beta l^5\left[\left(1-3\mathrm{csch}^2(\gamma l/2)\right)(u_xu_{xx})_{xx}-u_{xx}u_{xxx}\right]=0, \qquad (13)$$

где

$$\alpha^*=\frac{k}{4}\,\mathrm{cth}(\gamma l/2)\mathrm{csch}^2(\gamma l/2). \qquad (14)$$

Из (14) следует, что при $\gamma \to \infty$ величина $\alpha^* \to 0$. При $\gamma \to 0$ величины (12) и (14) ведут себя совершенно различным образом. Это дает основание считать, что распространение в решетке волн в случаях (2) и (3) с усилением дальнодействия может быть существенно различным.

Формально (13) следует из выражения (11) при замене в последнем $\mathrm{th}(\gamma l/2)$ на $\mathrm{cth}(\gamma l/2)$ и $\mathrm{sech}^2(\gamma l/2)$ на $-\mathrm{csch}^2(\gamma l/2)$.

4. Вначале сравним выражение (11) с соответствующим выражением работы [9]. Сравнение показывает, что в [9] по сравнению с (11) в члене с u_{xxxx} в величине α_0 (12) отсутствует множитель $\mathrm{th}(\gamma l/2)$, в члене с $(u_x u_{xx})_{xx}$ в круглой скобке отсутствует единица и полностью отсутствует последний член $u_{xx}u_{xxx}$. Также отметим, что в [9] значение α_0 уменьшено в два раза.

При $\gamma \to \infty$ из (11) и (13) следует уравнение

$$m\ddot{u} - 2\alpha l^2 u_{xx} - 6\beta l^3 u_x u_{xx} - \frac{1}{6}\alpha l^4 u_{xxxx} - \beta l^5 u_{xx}u_{xxx} - \frac{1}{2}\beta l^5 u_x u_{xxxx} = 0, \quad (15)$$

описывающее атомную цепочку в приближении взаимодействия ближайших соседей. При $k = 0$ из (11) и (13) имеем

$$m\ddot{u}_{xx} - 2\alpha l^2 u_{xxxx} - 6\beta l^3 u_x u_{xxxx} - 18\beta l^3 u_{xx}u_{xxx} = 0. \quad (16)$$

Справедливость этого уравнения легко проверить, рассмотрев выражение $m(\ddot{u}_{n+1} + \ddot{u}_{n-1})$ в приближении взаимодействия ближайших атомов.

Из расчета, выполненного в работе [9], при $k = 0$ следует результат (16), но при $\gamma \to \infty$ переход к (15) осуществляется лишь приближенно без учета в (15) последних двух слагаемых. Однако, исходя из (4), легко проверить, что в принятых приближениях наличие этих слагаемых в (15) необходимо. Отметим, что подобные слагаемые присутствуют в (16).

5. Прежде, чем исследовать свойства нелинейных волн, полезно рассмотреть решение уравнений (11) и (13) в виде плоской волны

$$u(x, t) = u_0 \exp[i(qx - \omega t)] \quad (17)$$

в пренебрежении ангармонизмом. В (17) q, ω и u_0 — волновой вектор, частота и амплитуда волны соответственно. Подставляя (17) в (11) и (13), для законов дисперсии имеем

$$\omega^2 = v^2 q^2 \left\{1 - \left[\frac{1}{12}q^2 l^2 + \frac{\alpha_0}{\alpha}\left(1 - \frac{1}{12}q^2 l^2\right)\right]\left[1 - \frac{1}{4}q^2 l^2 \mathrm{sech}^2(\gamma l/2)\right]^{-1}\right\} \quad (18)$$

и

$$\omega^2 = v^2 q^2 \left\{1 - \left[\frac{1}{12}q^2 l^2 - \frac{\alpha^*}{\alpha}\left(1 - \frac{1}{12}q^2 l^2\right)\right]\left[1 + \frac{1}{4}q^2 l^2 \mathrm{csch}^2(\gamma l/2)\right]^{-1}\right\} \quad (19)$$

соответственно. Здесь $v^2 = 2\alpha l^2/m$ — квадрат скорости звука в гармоническом приближении при наличии взаимодействия лишь ближайших атомов. При $\gamma \to \infty$ из (18) и (19) следует хорошо известный результат [11,12]

$$\omega^2 = v^2 q^2 \left(1 - \frac{1}{12} q^2 l^2\right), \tag{20}$$

соответствующий континуальному пределу ($ql \ll 1$).

Наряду со случаем $\gamma \to \infty$ дальнодействующее взаимодействие может быть исключено из рассмотрения требованием $k = 0$. Однако в этом случае, согласно (18) и (19), $\omega^2 = v^2 q^2$, если дополнительно (20) рассматривать как тождество (точный результат). Чтобы при $k = 0$ получить формулу (20), необходимо в (10) включить в расчет производные 6-го порядка.

Важно подчеркнуть, что в приведенном расчете принципиально условие $\gamma \neq 0$, иначе соотношение (7) не имеет смысла.

Из (18) следует, что $\omega^2 < 0$ при

$$\frac{\alpha_0}{\alpha}\left(1 - \frac{1}{12} q^2 l^2\right) > 1 - \frac{1}{12} q^2 l^2 \left[1 + 3\,\mathrm{sech}^2(\gamma l/2)\right] \tag{21}$$

или приближенно $\alpha_0 > \alpha$ при $ql \ll 1$, где α_0 дано в (12). Таким образом, при большой величине константы дальнодействующего взаимодействия k в (2) распространение плоских волн в решетке невозможно. Но, легко заметить из (13), распространение таких волн всегда возможно в случае V_{mn} вида (3).

6. Решение уравнений (11) и (13) для бегущих нелинейных волн будем искать в виде $u(x,t) = u(x - Vt)$, где V — скорость волны. Учитывая, что здесь $\ddot{u} = V^2 u_{xx}$, уравнения (11) и (13) перепишем в виде

$$\left(\frac{V^2}{v^2} - 1 + \frac{\alpha_0}{\alpha}\right) u_{xx} - 3\frac{\beta}{\alpha} l u_x u_{xx} - \frac{1}{12} l^2 \left[1 - \frac{\alpha_0}{\alpha} + 3\left(1 - \frac{V^2}{v^2}\right)\mathrm{sech}^2(\gamma l/2)\right] u_{xxxx} = 0 \tag{22}$$

и

$$\left(\frac{V^2}{v^2} - 1 - \frac{\alpha^*}{\alpha}\right) u_{xx} - 3\frac{\beta}{\alpha} l u_x u_{xx} - \frac{1}{12} l^2 \left[1 + \frac{\alpha^*}{\alpha} - 3\left(1 - \frac{V^2}{v^2}\right)\mathrm{csch}^2(\gamma l/2)\right] u_{xxxx} = 0, \tag{23}$$

пренебрегая в (11) и (13) членами пропорциональными l^5. Это означает, что в ряду Тейлора (10) мы ограничиваемся учетом производных лишь до 4-го порядка включительно.

Интегрирование (22) и (23) дает

$$\left(\frac{V^2}{v^2} - 1 + \frac{\alpha_0}{\alpha}\right) u_x - \frac{3}{2}\frac{\beta}{\alpha} l (u_x)^2 - \frac{1}{12} l^2 \left[1 - \frac{\alpha_0}{\alpha} + 3\left(1 - \frac{V^2}{v^2}\right)\mathrm{sech}^2(\gamma l/2)\right] u_{xxx} + a_1 = 0 \tag{24}$$

и

$$\left(\frac{V^2}{v^2} - 1 - \frac{\alpha^*}{\alpha}\right) u_x - \frac{3}{2}\frac{\beta}{\alpha} l (u_x)^2 - \frac{1}{12} l^2 \left[1 + \frac{\alpha^*}{\alpha} - 3\left(1 - \frac{V^2}{v^2}\right)\mathrm{csch}^2(\gamma l/2)\right] u_{xxx} + a_1 = 0, \tag{25}$$

где a_1 — постоянная интегрирования. Умножим выражения (24) и (25) на u_{xx} и далее их проинтегрируем. В результате для переменной $Z(x) = u_x$, описывающей локальную деформацию атомной цепочки, можно получить уравнение

$$(dZ/dx)^2 = -AZ^3 + BZ^2 + a_1 Z + a_2, \tag{26}$$

где

$$A = 12\frac{\beta}{\alpha}l^{-1}\left[1 - \frac{\alpha_0}{\alpha} + 3\left(1 - \frac{V^2}{v^2}\right)\operatorname{sech}^2(\gamma l/2)\right]^{-1},$$

$$B = 12l^{-2}\left(\frac{V^2}{v^2} - 1 + \frac{\alpha_0}{\alpha}\right)\left[1 - \frac{\alpha_0}{\alpha} + 3\left(1 - \frac{V^2}{v^2}\right)\operatorname{sech}^2(\gamma l/2)\right]^{-1} \tag{27}$$

— для уравнения (24) и

$$A = 12\frac{\beta}{\alpha}l^{-1}\left[1 + \frac{\alpha^*}{\alpha} - 3\left(1 - \frac{V^2}{v^2}\right)\operatorname{csch}^2(\gamma l/2)\right]^{-1},$$

$$B = 12l^{-2}\left(\frac{V^2}{v^2} - 1 - \frac{\alpha^*}{\alpha}\right)\left[1 + \frac{\alpha^*}{\alpha} - 3\left(1 - \frac{V^2}{v^2}\right)\operatorname{csch}^2(\gamma l/2)\right]^{-1} \tag{28}$$

— для уравнения (25). Величины α_0 и α^* определены в (12) и (14).

Уравнение (26) удобно представить в виде

$$(dZ/dx)^2 = -A(Z - c_1)(Z - c_2)(Z - c_3), \tag{29}$$

где без потери общности можно считать $c_3 > c_2 > c_1$. Из (26) и (29) имеем

$$B = A(c_1 + c_2 + c_3), \quad a_1 = -A(c_1c_2 + c_1c_3 + c_2c_3), \quad a_2 = Ac_1c_2c_3. \tag{30}$$

7. Решение уравнения (29) зависит от знака A. Используя [13], из (29) можно получить при $A < 0$

$$\frac{2}{\sqrt{c_3 - c_1}}F(\varphi, \tilde{k}) =$$

$$= \begin{cases} \sqrt{-A}(x - x_0), & \varphi = \arcsin\left(\frac{Z - c_3}{Z - c_2}\right)^{1/2}, \quad Z > c_3 > c_2 > c_1; & \text{(31a)} \\ \sqrt{-A}(x - x_0), & \varphi = \arcsin\left(\frac{Z - c_1}{c_2 - c_1}\right)^{1/2}, \quad c_3 > c_2 \geqslant Z > c_1; & \text{(31b)} \\ \sqrt{-A}(x_0 - x), & \varphi = \arcsin\left(\frac{(c_3 - c_1)(c_2 - Z)}{(c_2 - c_1)(c_3 - Z)}\right)^{1/2}, \quad c_3 > c_2 > Z \geqslant c_1; & \text{(31c)} \end{cases}$$

где

$$\tilde{k} = \left(\frac{c_2 - c_1}{c_3 - c_1}\right)^{1/2}. \tag{32}$$

Аналогично при $A > 0$ имеем

$$\frac{2}{\sqrt{c_3 - c_1}} F(\varphi, \tilde{k}) =$$

$$= \begin{cases} \sqrt{A}(x_0 - x), & \varphi = \arcsin\left(\frac{c_1 - Z}{c_2 - Z}\right)^{1/2}, \quad c_3 > c_2 > c_1 > Z; & (33a) \\ \sqrt{A}(x_0 - x), & \varphi = \arcsin\left(\frac{c_3 - Z}{c_3 - c_2}\right)^{1/2}, \quad c_3 > Z \geqslant c_2 > c_1; & (33b) \\ \sqrt{A}(x - x_0), & \varphi = \arcsin\left(\frac{(c_3 - c_1)(Z - c_2)}{(c_3 - c_2)(Z - c_1)}\right)^{1/2}, \quad c_3 \geqslant Z > c_2 > c_1; & (33c) \end{cases}$$

где

$$\tilde{k} = \left(\frac{c_3 - c_2}{c_3 - c_1}\right)^{1/2}. \qquad (34)$$

Здесь $F(\varphi, \tilde{k})$ — эллиптический интеграл I-го рода, причем [14]

$$F(\varphi, 0) = \varphi, \qquad F(\varphi, 1) = \ln \operatorname{tg}\left(\frac{\pi}{4} + \frac{\varphi}{2}\right). \qquad (35)$$

Вначале исследуем случай $\tilde{k} = 0$, которому удовлетворяют лишь решения (31a) и (33a). При $c_2 \to c_1$ в (32) и $c_3 \to c_2$ в (34) имеем

$$Z = \frac{c_3 - c_1 \sin^2\left[1/2\sqrt{-A(c_3 - c_1)}(x - x_0)\right]}{\cos^2\left[1/2\sqrt{-A(c_3 - c_1)}(x - x_0)\right]} \qquad (36)$$

и

$$Z = \frac{c_1 - c_2 \sin^2\left[1/2\sqrt{A(c_3 - c_1)}(x - x_0)\right]}{\cos^2\left[1/2\sqrt{A(c_3 - c_1)}(x - x_0)\right]} \qquad (37)$$

соответственно. Однако эти решения обладают расходимостью и поэтому должны быть отброшены. Таким образом распространение кноидальных волн в рассматриваемой задаче невозможно.

Рассмотрим случай $\tilde{k} = 1$, реализуемый при $c_3 \to c_2$ в (32) и $c_2 \to c_1$ в (34). Здесь нам необходимо воспользоваться решениями (31b) и (33b). Используя тригонометрические тождества, преобразуем $F(\varphi, 1)$ (35) к удобному для расчета виду

$$F(\varphi, 1) = \ln\left(\frac{\sin\varphi - \sqrt{1 - \sin^2\varphi} + 1}{\sin\varphi + \sqrt{1 - \sin^2\varphi} - 1}\right). \qquad (38)$$

Пусть правая часть (38) равна некоторой величине y. Тогда легко показать, что

$$\sqrt{1 - \sin^2\varphi} = 1 - \operatorname{th}(y/2)\sin\varphi. \qquad (39)$$

Возведя обе части в квадрат, можно получить

$$\operatorname{th}^2(2y) = \sin^2\varphi. \tag{40}$$

Теперь, учитывая решения (31b) и (33b), для Z имеем

$$Z = c_1 + (c_2 - c_1)\operatorname{th}^2\left[\frac{1}{2}\sqrt{-A(c_2-c_1)}(x-x_0)\right] \tag{41}$$

и

$$Z = c_3 - (c_3 - c_1)\operatorname{th}^2\left[\frac{1}{2}\sqrt{A(c_3-c_1)}(x-x_0)\right]. \tag{42}$$

Принимая граничное условие $Z = 0$ при $x \to \pm\infty$, имеем $c_2 = 0$ в (41) и $c_1 = 0$ в (42). Тогда из (30) с учетом условия $\tilde{k} = 1$ следует, что константы c_1 в (41) и c_3 в (42) равны B/A. Отсюда независимо от знака A имеем

$$Z = \frac{B}{A}\left\{1 - \operatorname{th}^2\left[\frac{1}{2}\sqrt{B}(x-x_0)\right]\right\}, \tag{43}$$

где под x следует понимать $x - Vt$. Для солитонного решения необходимо выполнение граничного условия $Z_x \to 0$ при $x \to \pm\infty$. Легко убедиться, что это возможно лишь при $B > 0$. Решение (43) с $B < 0$ не имеет физического смысла, поскольку допускает расходимости.

8. Исследуем свойства солитонного решения (43). Подчеркнем, что α, α_0, $\alpha^* > 0$. Расчету с V_{mn} (2) соответствуют величины A и B (27). Здесь $B > 0$, если одновременно выполняются неравенства

$$V^2/v^2 > 1 - \frac{\alpha_0}{\alpha}, \tag{44}$$

$$3\left(1 - \frac{V^2}{v^2}\right)\operatorname{sech}^2\left(\frac{\gamma l}{2}\right) > \frac{\alpha_0}{\alpha} - 1. \tag{45}$$

Легко проверить, что одновременное выполнение обратных к (44) и (45) неравенств невозможно. Из (44) и (45) следует, что независимо от соотношения между величинами α и α_0 скорости солитонов $V < v$. При $\alpha_0 > \alpha$, как видно из (45), заведомо выполняется условие $\alpha_0 < 4\alpha$, что согласно (12) накладывает ограничения на возможные значения параметров k и γ дальнодействующей части межатомного взаимодействия. Так, при $\operatorname{ch}(\gamma l) = 2$ обязательно выполняется неравенство $k < 8\sqrt{3}\alpha$. Однако отсутствуют какие-либо ограничения на эти параметры при $\alpha_0 < \alpha$. В отсутствие дальнодействия ($\gamma \to \infty$), как видно из (44) и (45), скорости солитонов удовлетворяют условию $V > v$. Следовательно, солитоны с дозвуковыми скоростями $V < v$ могут существовать лишь при наличии дальнодействующей части во взаимодействии атомов.

В рассматриваемом случае знак величины A (27) определяется знаком константы ангармонизма β гамильтониана (1). В зависимости от знака β реализуются либо солитоны сжатия ($\beta < 0$), либо — растяжения ($\beta > 0$). Одновременное существование здесь солитонов сжатия и растяжения невозможно.

Расчету с V_{mn} (3) соответствуют величины A и B (28). При этом $B > 0$, если

$$V^2/v^2 > 1 + \frac{k}{4\alpha}\operatorname{cth}(\gamma l/2)\operatorname{csch}^2(\gamma l/2), \tag{46}$$

скорости солитонов удовлетворяют условию $V > v$. При фиксированном значении k, как следует из (46), с уменьшением γ ($\gamma \neq 0$) растет минимальная скорость солитона $V_{\min}$. Знак величины A в данном случае совпадает со знаком β. При $\beta > 0$ мы имеем дело с солитонами растяжения, а при $\beta < 0$ — с солитонами сжатия.

Однако в обсуждаемом случае возможны и солитоны со скоростями $V < v$. Для этого необходимо выполнение неравенства

$$3\left(1 - \frac{V^2}{v^2}\right)\operatorname{csch}^2(\gamma l/2) > 1 + \frac{\alpha^*}{\alpha}. \tag{47}$$

Существование таких солитонов обусловлено наличием дальнодействия во взаимодействии атомов. Неравенство (47) при $\gamma l \ll 1$, т. е. при больших размерах области дальнодействия, может быть выполнено только при

$$k < 6\gamma l\alpha. \tag{48}$$

Для солитонов со скоростями $V < v$ знак A противоположен знаку β. При $\beta > 0$ реализуются солитоны сжатия, а при $\beta < 0$ — солитоны растяжения. Если в (1) зафиксировать знак β, то при дальнодействии с V_{mn} (3) в атомной цепочке возможно одновременное существование солитонов сжатия и растяжения.

9. Солитону вида Z (43) соответствует ступенчатый переход от значения смещений атомов $u^* = -4\sqrt{B}/A$ при $x = -\infty$ до нулевого значения при $x = \infty$, перемещающийся вдоль оси x со скоростью V. Ширина солитона равна $\Delta x = 4\pi/\sqrt{B}$, а амплитуда — $Z_0 = B/|A|$. Принятое в расчете континуальное приближение само по себе законно лишь при $\Delta x \gg l$. Анализ зависимости Δx и Z_0 от k и γ может быть проведен в общем случае лишь численно с заданием конкретных величин k и γ. Мы лишь укажем, что при рассмотрении выражений A и B (27) в случае максимума α_0, реализуемого при $\operatorname{ch}(\gamma l) = 2$, имеет место соотношение

$$Z_0 < \left(2 - \frac{V^2}{v^2}\right)\frac{\alpha}{|\beta| l}. \tag{49}$$

В этом случае амплитуда солитона всегда меньше величины $2\alpha/|\beta|l$.

Таким образом, использование в расчете дальнодействующего межатомного взаимодействия с различным характером поведения, определяемого величиной V_{mn} либо вида (2), либо вида (3), существенно сказывается на свойствах солитонных решений. При выбранном типе взаимодействия конкретные свойства солитонов в большой степени определяются значениями величин k и γ, т. е. силой и характерным размером области межатомного дальнодействия.

Учет в расчете производных 5-го порядка в ряду (10) представляет собой отдельную задачу.

Список литературы

[1] Давыдов А.С. Солитоны в молекулярных системах. Киев: Наук. думка, 1984. 288 с.
[2] Ньюэлл А. Солитоны в математике и физике. М.: Мир, 1989. 326 с.
[3] Косевич А.М. // Препринт ИФМ СО АН СССР. Свердловск, 1975. 37 с.
[4] Wadati M. // J. Phys. Soc. Japan. 1979. V. 38. N 3. P. 673–680.
[5] Сабиров Р.Х. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 4. С. 167–171.
[6] Sabirov R.Kh. // Acta Phys. Pol. A. 1992. V. 81. N 4–5. P. 535–542.
[7] Беклемишев С.А., Клочихин В.Л. // ФТТ. 1990. Т. 32. № 9. С. 2728–2733.
[8] Pnevmatikov S. // C. r. Acad. Sci. Ser. 2. 1983. V. 296. N 14. P. 1031–1034.
[9] Савин Е.С. // УФЖ. 1986. Т. 31. N 8. С. 1145–1149.
[10] Weiss G.H. // Bull. Res. Couns. Israel. F. 1968. V. 7. № 1. P. 165–170.
[11] Рейсленд Дж. Физика фононов. М.: Мир, 1975. 367 с.
[12] Вонсовский С.В., Кацнельсон М.И. Квантовая физика твердого тела. М.: Наука, 1983. 336 с.
[13] Прудников А.П., Брычков Ю.А., Маричев О.И. Интегралы и ряды. М.: Наука, 1981. 800 с.
[14] Справочник по специальным функциям / Под ред. А. Абрамовица, И. Стиган. М.: Наука, 1979. 832 с.