

УДК 538.9

©1995

КНОИДАЛЬНЫЕ ВОЛНЫ В НАГРУЖЕННОЙ АТОМНОЙ ЦЕПОЧКЕ С АНГАРМОНИЗМОМ ТРЕТЬЕГО И ЧЕТВЕРТОГО ПОРЯДКОВ

Р.Х. Сабиров

Московский педагогический государственный университет
Поступило в Редакцию 4 мая 1994 г.

Исследованы особенности распространения и свойства кноидальных волн в атомной цепочке с ангармонизмом 3- и 4-го порядков, подверженной внешней растягивающей силе F . Показано, что свойства этих волн существенно зависят от значения параметра $b = \alpha\gamma/\beta^2$, где α — упругая постоянная, β и γ — коэффициенты кубичного и квартетного ангармонизмов. Обсужден вопрос о свойствах кноидальных волн, когда на цепочку действует внешнее постоянное давление. В этом случае всегда возможно распространение кноидальных волн в цепочке. Отмечено, что действие растягивающей и сжимающей сил сказывается на свойствах кноидальных волн существенно различным образом.

1. Вадати [1] рассмотрел распространение нелинейных волн в атомной цепочке с кубичным и квартетным ангармонизмом. В континуальном приближении он показал, что в такой решетке могут существовать солитоны и кноидальные волны. В работах [2,3] исследовано распространение солитонов в аналогичной цепочке, на концы которой действует постоянная растягивающая сила F , а в [4] — постоянная сила давления P .

В экспериментах по машинному моделированию [5] показано, что половина введенной за счет нагрузки растяжения в цепочку энергии идет на излучение нелинейных волн, сопровождающее процесс разрыва межатомной связи. При этом основная часть нелинейных волн обладает скоростями V , меньшими скорости звука v в решетке. Это означает, что в основном излучаются не солитоны, а кноидальные волны. В связи с этим возникает вопрос об исследовании особенностей распространения кноидальных волн в нагруженных решетках, что осталось вне поля зрения работ [2-4].

2. Как показано в [2], потенциальную энергию атомов цепочки, на концы которой действует растягивающая сила F , можно представить в виде

$$U = \sum_{n=1}^N \left[\alpha k_2 (u_n - u_{n-1})^2 - \beta k_3 (u_n - u_{n-1})^3 + \gamma (u_n - u_{n-1})^4 \right], \quad (1)$$

где u_n — смещение n -го атома из положения равновесия при наличии силы F , α — упругая постоянная, β, γ — постоянные ангармонизма 3-го и 4-го порядков (считаем $\alpha, \beta, \gamma > 0$), вычисленные при $F = 0$. Остальные величины в (1) определяются выражениями

$$k_2 = 1 - 3y + 6by^2, \quad k_3 = 1 - 4by, \quad b = \frac{\alpha\gamma}{\beta^2}. \quad (2)$$

Значение y дается решением уравнения

$$12by^3 - 9y^2 + 6y - \frac{F}{F_d} = 0, \quad (3)$$

причем из физических соображений необходимо ограничиться только той ветвью решения, которая стремится к нулю при $F \rightarrow 0$. В (3) $F_d = \alpha^2/3\beta$ — сила, при которой имеет место чисто механическое разрушение цепочки при наличии лишь кубического ангармонизма. Отметим, что новое положение равновесия атомов определяется величиной $l = a + a_0$, где $a_0 = \frac{\alpha}{\beta}y$, a — равновесное межатомное расстояние при $F = 0$.

3. Введем в рассмотрение величину $Z(x)$, где под x следует понимать $x-Vt$. Здесь t — время. Величина $Z = du/dx$, где u — функция смещения равновесных положений атомов. Следовательно, $Z(x)$ описывает локальную деформацию атомной цепочки. Следуя расчету работ [1,4], для определения Z можно получить уравнение

$$(dZ/dx)^2 = -AZ^4 - BZ^3 + CZ^2 + d_1Z + d_2, \quad (4)$$

где

$$A = 12\frac{\gamma}{\alpha k_2}, \quad B = -12\frac{k_3\beta}{k_2\alpha l}, \quad C = \frac{12}{l^2} \left(\frac{V^2}{v^2} - 1 \right), \quad (5)$$

d_1, d_2 — постоянные интегрирования, v — скорость звука в нагруженной решетке.

Исследуем влияние внешней силы на распространение нелинейных волн в решетке. Согласно [1], перепишем (4) в виде

$$(dZ/dx)^2 = -A(Z - c_1)(Z - c_2)(Z - c_3)(Z - c_4), \quad (6)$$

где параметры c_1, c_2, c_3, c_4 определяются соотношениями

$$B = -(c_1 + c_2 + c_3 + c_4)A,$$

$$C = -[c_1c_2 + c_3c_4 + (c_1 + c_2)(c_3 + c_4)]A,$$

$$d_1 = [c_1c_2(c_3 + c_4) + c_3c_4(c_1 + c_2)]A,$$

$$d_2 = -c_1c_2c_3c_4A. \quad (7)$$

Отличие от результатов Вадати [1] здесь состоит в том, что параметры A , B и C (5), входящие в (6) и (7), согласно (2) и (3), зависят от внешней силы F .

Без потери общности можно принять $c_1 < c_2 < c_3 < c_4$. Интегрируя (6), имеем [1]

$$Z = \frac{\left(\frac{c_3-c_1}{c_4-c_3}\right) c_4 + c_1 \operatorname{sn}^2 \left\{ \frac{\sqrt{A}}{2} \sqrt{(c_4-c_2)(c_3-c_1)}(x-x_0); k \right\}}{\frac{c_3-c_1}{c_4-c_3} + \operatorname{sn}^2 \left\{ \frac{\sqrt{A}}{2} \sqrt{(c_4-c_2)(c_3-c_1)}(x-x_0); k \right\}} \quad (8)$$

в случае $c_3 < Z < c_4$ и

$$Z = \frac{\left(\frac{c_4-c_2}{c_2-c_1}\right) c_1 + c_4 \operatorname{sn}^2 \left\{ \frac{\sqrt{A}}{2} \sqrt{(c_4-c_2)(c_3-c_1)}(x-x_0); k \right\}}{\frac{c_4-c_2}{c_2-c_1} + \operatorname{sn}^2 \left\{ \frac{\sqrt{A}}{2} \sqrt{(c_4-c_2)(c_3-c_1)}(x-x_0); k \right\}} \quad (9)$$

в случае $c_1 < Z < c_2$. В (8) и (9)

$$k = \sqrt{\left(\frac{c_4-c_3}{c_4-c_2}\right) \left(\frac{c_2-c_1}{c_3-c_1}\right)}, \quad (10)$$

sn — эллиптическая функция Якоби.

Для полноты анализа задачи приведены и решения типа солитонов. Случай $k = 1$ в (10) достигается при $c_2 = c_3 = 0$ и при $c_1 = c_4 = 0$. Однако последнее неприемлемо, поскольку при этом в (8) и (9) $Z \equiv 0$. Принимая во внимание тождество $\operatorname{sn}(x, 1) = \operatorname{th}(x)$ [5], из (8) и (9) с учетом (7) можно получить солитонные решения типа

$$Z = 2C \left\{ \left(B + \sqrt{B^2 + 4AC} \right) \operatorname{ch}^2 \left(\frac{\sqrt{C}}{2} (x + x_0) \right) + \left(-B + \sqrt{B^2 + 4AC} \right) \operatorname{sh}^2 \left(\frac{\sqrt{C}}{2} (x + x_0) \right) \right\}^{-1} \quad (11)$$

при

$$\frac{1}{2A} \left(-B + \sqrt{B^2 + 4AC} \right) \geq Z \geq 0 \quad (12)$$

и

$$Z = -2C \left\{ \left(-B + \sqrt{B^2 + 4AC} \right) \operatorname{ch}^2 \left(\frac{\sqrt{C}}{2} (x + x_0) \right) + \left(B + \sqrt{B^2 + 4AC} \right) \operatorname{sh}^2 \left(\frac{\sqrt{C}}{2} (x + x_0) \right) \right\}^{-1} \quad (13)$$

при

$$0 \geq Z \geq \frac{1}{2A} \left(-B - \sqrt{B^2 + 4AC} \right) \quad (14)$$

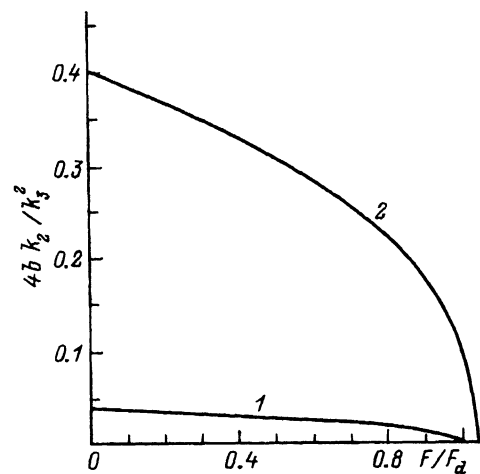


Рис. 1. Зависимость параметра $4bk_2/k_3^2$ от внешней силы F при $b < 3/8$.

Значения b : 1 — 0.01, 2 — 0.1.

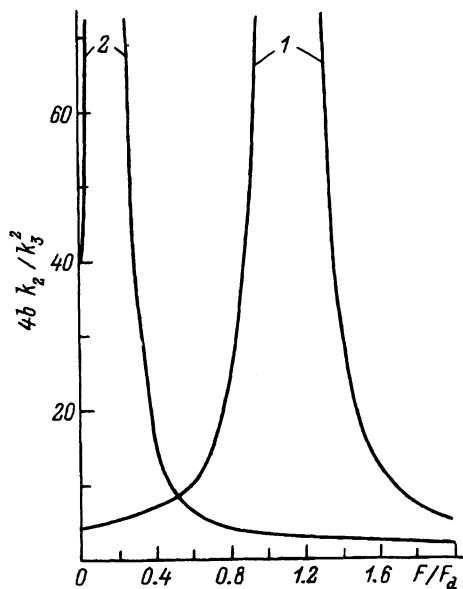


Рис. 2. Зависимость параметра $4bk_2/k_3^2$ от внешней силы F при $b > 3/8$.

Значения b : 1 — 1.0, 2 — 10.

5. Таким образом, кноидальные волны отсутствуют в нагруженной атомной цепочке в двух случаях: во-первых, если $b < 3/8$, а $F = F^*$ и, во-вторых, если $b \geq 3/8$; а $F = F_0$. В остальных случаях, согласно (5) и (15), кноидальные волны существуют в решетке при выполнении неравенства

$$1 > 4b \frac{k_2}{k_3^2} \left(1 - \frac{V^2}{v^2} \right), \quad (20)$$

налагающего ограничение на возможные значения их скоростей.

Как видно из (20), важным параметром задачи является величина $4bk_2/k_3^2$. Ее зависимость от силы F дана на рис. 1, 2 для случаев $b < 3/8$ и $b > 3/8$ соответственно. Решение для случая $b = 3/8$ будет рассмотрено далее. Рис. 1 и 2 передают все характерные особенности поведения отмеченной величины. Обратим внимание лишь на то, что эта величина равна нулю при $F = F^*$, когда $b < 3/8$, и стремится к бесконечности при $F \rightarrow F_0$ ($F_0 = 1.1230$ и $0.1462F_d$ при $b = 1$ и 10), если $b > 3/8$.

На основе (20) и данных рис. 1 можно заключить, что при $b < 3/8$ практически реализуется весь спектр возможных скоростей кноидальных волн. Из рис. 2 и (20) следует, что при $F_0 \geq F \geq 0$ минимальная скорость V_{\min} кноидальной волны увеличивается с ростом F , стремясь к v при $F \rightarrow F_0$. При этом интервал возможных скоростей V уменьшается как с ростом F , так и особенно резко с ростом b . Напротив, при $F > F_0$ интервал возможных скоростей V существенно увеличивается с ростом F , причем V_{\min} уменьшается и с ростом b , и с ростом F .

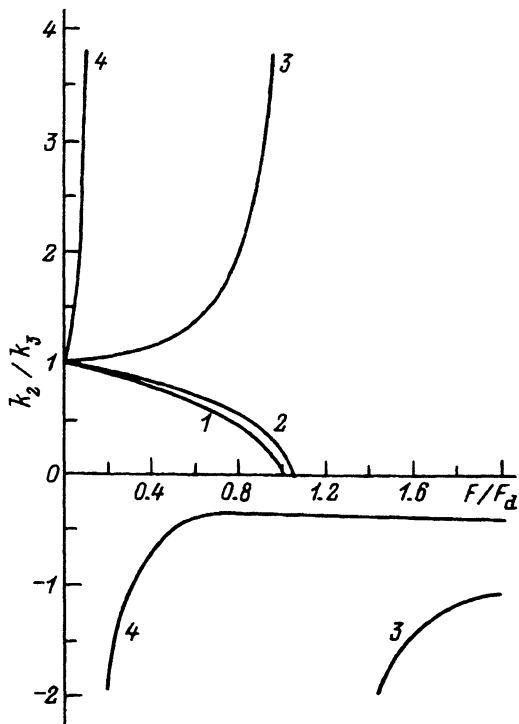


Рис. 3. Зависимость параметра k_2/k_3 от внешней силы F .
Значения b : 1 — 0.01, 2 — 0.1, 3 — 1.0, 4 — 10.

Для длины кноидальной волны из (15) и (17) имеем

$$\lambda = \frac{\pi}{\sqrt{3}} \left(1 - \frac{V^2}{v^2}\right)^{-1/2} l, \quad (21)$$

т.е. с ростом V растёт и λ . Однако здесь следует помнить о выше отмеченных ограничениях на значения V . Длина волны λ (21) также зависит от F благодаря зависимости от F величин l и v .

Вместо $Z(x)$ удобнее рассматривать величину $Z^*(x) = (\beta l/\alpha) \times Z(x)$. Амплитуду такой кноидальной волны с учетом (5) и (15) можно представить в виде

$$Z_{\max}^* = 2 \frac{k_2}{|k_3|} \frac{1 - \frac{V^2}{v^2}}{1 - \sqrt{1 - 4b \frac{k_2}{k_3^2} \left(1 - \frac{V^2}{v^2}\right)}}. \quad (22)$$

Формально считая в (22) величину $1 - V^2/v^2$ аргументом функции Z_{\max}^* , легко показать, что производная Z_{\max}^* по данному аргументу отрицательна. Следовательно, с ростом V растёт амплитуда кноидальной волны. Зависимость отношения k_2/k_3 , входящего в (22), от силы F представлена на рис. 3. Из данных рис: 1, 2, 3 можно заключить, что зависимость Z_{\max}^* от F и b в общем случае сложна.

На основе (22), точнее (15), и ранее полученных результатов можно убедиться, что $Z(x) > 0$ при $b < 3/8$, а также при $b > 3/8$, если $F < F_0$, и $Z(x) < 0$ при $F > F_0$.

6. Рассмотрим случай $b = 3/8$, который представляет особый интерес, поскольку уравнение (3) может быть решено аналитически. В результате имеем

$$k_2 = \left(1 - \frac{3}{4} \frac{F}{F_d}\right)^{2/3}, \quad k_3 = \left(1 - \frac{3}{4} \frac{F}{F_d}\right)^{1/3}. \quad (23)$$

Отсюда с учетом (5) и (15) имеем

$$Z^*(x) = 2 \left(1 - \frac{3}{4} \frac{F}{F_d}\right)^{1/3} \left(1 - \frac{V^2}{v^2}\right) \left\{1 - \sqrt{\frac{3}{2} \left(\frac{V^2}{v^2} - \frac{1}{3}\right)} \times \right. \\ \left. \times \cos \left[2\sqrt{3 \left(1 - \frac{V^2}{v^2}\right) \frac{x}{l}}\right]\right\}^{-1}. \quad (24)$$

Скорость волны (24) заключена в пределах $v > V \geq v/\sqrt{3}$, что, согласно (21), означает, что длины волн $\lambda \geq \pi l/\sqrt{2}$. Из (24) имеем $Z^*(x) > 0$ при $F_0 > F \geq 0$, $Z^*(x) = 0$ при $F = F_0$ и $Z^*(x) < 0$ при $F > F_0$ с $F_0 = (4/3)F_d$. При $F \gg F_d$ амплитуда волны $Z_{\max}^* \sim F^{1/3}$, т.е. неограниченно возрастает с ростом F . Здесь уместно заметить, что нагруженная атомная цепочка с кубичным и квартетным ангармонизмом не может быть разрушена в принципе.

7. В заключение полезно упомянуть о следующем. Если в (3) F заменить на P , то мы будем иметь дело с атомной цепочкой, подверженной внешнему давлению P . При такой замене уравнение (3) независимо от b и P всегда имеет отрицательные решения для y , которые при $P \rightarrow 0$ обращаются в нуль. При этом всегда $k_2, k_3 > 0$. Это означает, что в условиях давления в решетке всегда могут распространяться кноидальные волны, причем $Z(x) > 0$ при любых величинах b и P (естественно, что величина P ограничена сверху, атомы нельзя втиснуть друг в друга). При замене в (24) F на P мы получим при условии $b = 3/8$ формулу кноидальной волны, соответствующую атомной цепочке, подверженной внешнему давлению.

Из сказанного можно сделать следующий вывод: действия растягивающей и сжимающей сил на атомную цепочку сказываются на свойствах кноидальных волн существенно различным образом.

Список литературы

- [1] Wadati M. // J. Phys. Soc. Jap. 1975. V. 38. N 3. P. 673–680.
- [2] Сабиров Р.Х. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 4. С. 167–171.
- [3] Сабиров Р.Х. // ФТТ. 1990. Т. 32. № 7. С. 1992–1995.
- [4] Sabirov R.Kh. // Acta. Phys. Pol. A. 1992. V. 81. N 4–5. P. 535–542.
- [5] Справочник по специальным функциям / Под ред. М. Абрамовица и И. Стиган. М.: Наука, 1979. С. 380.