

УДК 539.21: 678.01

©1995

ДИНАМИКА АНГАРМОНИЧЕСКОЙ ЦЕПОЧКИ В МОДЕЛИ ФРЕНКЕЛЯ–КОНТОРОВОЙ

С.А.Беклемишев, В.Л.Клочихин

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

Поступило в Редакцию 12 мая 1994 г.

Получены решения уравнения движения для модели Френкеля–Конторовой с учетом ангармонизма атом-атомного взаимодействия. Найдены поправки к известным решениям в гармоническом приближении 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. В этой модели рассматривается одномерная цепочка, состоящая из связанных пружинками частиц и помещенная в периодический потенциал G с периодом h . Гамильтониан H такой системы есть

$$H = \sum_n \left(m\dot{X}_n^2/2 + G(X_n) + U(R_n) \right), \quad (1)$$

где X_n — смещение атома цепочки массы m из n -го минимума потенциала G подложки, а под знаком суммы по всем атомам стоят кинетическая энергия n -го атома, периодический потенциал $G(X_n)$ и упругая энергия связи атомов в цепочке $U(R_n)$. Энергия связи $U(R_n)$ определяется удлинением связи $R_n = X_n - X_{n-1} + h - b$, где X_n — смещение атома из n -го минимума потенциала $G(X_n)$, b — период цепочки в невозмущенном состоянии.

Предположив, что периоды h и b близки (величина их несоответствия $t = (1 - b/h)$ мала), и считая R_n и X_n медленно изменяющимися функциями n , в (1) можно перейти в континуальное приближение [2].

Ранние исследования [1–5] систем с гамильтонианом (1) ограничивались рассмотрением гармонического межатомного потенциала $U(R_n)$ (модель Френкеля–Конторовой). Более реалистичным является предположение об ангармоническом атом-атомном взаимодействии $U(R)$ [6–12]. Наличие точки перегиба R_c ангармонического потенциала $U(R)$ приводит к появлению новых решений в модели Френкеля–Конторовой [6,7,9]. В работе [6] был рассмотрен случай релаксирующей подложки. Далее мы ограничимся случаем жесткой подложки с периодическим

потенциалом, однако учтем ангармонизм цепочки. В работах [6,7,9] было показано, что учет ангармонизма может привести к появлению новых решений, в том числе так называемых «искаженных волн» [9].

Реальное ангармоническое атом-атомное взаимодействие в первом приближении описывается уже в случае учета в рассматриваемой модели кубической ангармонической поправки атом-атомного взаимодействия. Потенциал атом-атомного взаимодействия в виде полинома третьей степени имеет точку перегиба и затем максимум в области деформации растяжения и по характеру поведения подобен потенциалам Морзе и Леннарда-Джонса, если к концам цепочки приложена внешняя растягивающая нагрузка. Кубический потенциал при больших деформациях описывает разлетное состояние как бы растянутой внешней силой цепочки. В работах [8,10,12] исследованы поправки к известным решениям уравнения Френкеля-Конторовой с учетом ангармонизма и не найдены новые типы решений.

Рассмотрим влияние ангармонизма межатомного взаимодействия на решения в модели Френкеля-Конторовой. Будем искать решения в виде бегущих волн с координатой $x - vt$, $x = nh$ — Лагранжева координата, а штрих будет обозначать производную по непрерывной в континуальном пределе переменной n , v — скорость волны, t — время.

Приведем гамильтониан (1) системы к безразмерному виду поделив его на величину fh^2 , где f — жесткость связи атомов недеформированной цепочки.

$$H = \sum (\nu(y'_n)^2/2 + g(y_n) + u(r_n)), \quad (2)$$

где $\nu = v^2/c^2$, $c^2 = h^2 f/m$ и $y_n = X_n/h$. Периодический потенциал может быть выбран в обычном [1,2] виде $g(y_n) = a(1 - \cos(2\pi y_n))/(2\pi)$, где a — его безразмерная амплитуда. $u(r_n) = (r_n^2/2) - \gamma r_n^3/3$, где $r_n = y_n - y_{n-1} + t$ — деформация n -й связи, γ — безразмерная постоянная ангармонизма. Суммирование ведется по всем атомам цепочки.

Из гамильтониана (2) можно получить уравнение движения

$$\nu y''_n + dg(y_n)/dy_n + p_{n+1} - p_n = 0, \quad (3)$$

где $dg(y_n)/dy_n = a \sin(2\pi y_n)$, $p_n = \gamma r_n^2 - r_n$ — сила атом-атомной связи. Используем для $y_{n\pm 1}$ разложение в ряд, откуда

$$\beta y'' = dg(y)/dy + 2\gamma y' y'', \quad (4)$$

где $\beta = 1 - \nu - 2\gamma t$.

Если в (4) не учитывать слагаемое, содержащее постоянную ангармонизма γ , то получим обычное уравнение модели Френкеля-Конторовой [1].

Мы пренебрегли членами разложения, начиная со слагаемого $y^{(4)}/12$. Это оправдано, если по абсолютной величине отброшенные слагаемые разложения меньше каждого из слагаемых (4). Сделав данную оценку, получим, что уравнение (4) справедливо при условиях

$$\lambda \gg 1/(24\gamma), \quad \lambda \gg 1/(12a), \quad \lambda \gg 1/(12\beta)^{1/2}, \quad (5)$$

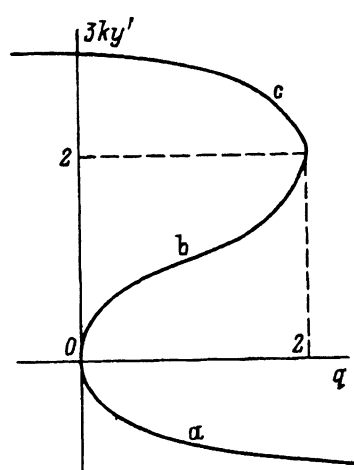


Рис. 1. Решения а, в и с уравнения движения (7).

где λ имеет смысл длины, на которой происходит существенное изменение деформаций. Это может быть ширина солитона, период волны деформаций.

Интегрируя (4), приходим к уравнению

$$(y')^2(\beta/2) - 2(y')^3\gamma/3 = E + g(y), \quad (6)$$

где E — константа интегрирования.

Решения уравнения (6) в пределе модели Френкеля-Конторовой (при $\gamma = 0$) разбиваются на два класса: решения, перемещающиеся со скоростью меньшей характеристической скорости c ($\nu < 1$), и решения, распространяющиеся со скоростью превышающей эту характеристическую скорость c ($\nu > 1$). Дозвуковые решения в пределе $\nu \rightarrow 0$ дают статические волны (например, покоящиеся дислокации). Сверхзвуковые решения при $\nu \rightarrow 1$ дают акустические волны. Рассмотрим волны с $\nu < 1$.

Уравнение (6) является кубическим уравнением относительно y' . Можно показать, что оно имеет следующие три ветви решений (рис. 1).

$$3ky' = \begin{cases} 1 - \sqrt{3} \sin(s) - \cos(s), & 3ky' < 0, & a \\ 1 + \sqrt{3} \sin(s) - \cos(s), & 0 < 3ky' < 2, & b \\ 1 + 2 \cos(s), & 3ky' > 2, & c \end{cases} \quad (7)$$

где $s = (\arccos(1 - q))/3$, $k = 4\gamma/(3\beta)$, $q = 81k^3(E + g(y))/(4\gamma)$. При значениях аргумента $|1 - q| > 1$ формулу (7) следует понимать в смысле аналитического продолжения функции $\arccos(1 - q)$, где формулы (а) и (с) будут действительными и иметь вид формулы Кардано.

Аналитические продолжения ветвей (7а) и (7с) соответственно при $3ky' < -1$ и $3ky' > 3$ (рис. 1) плавно продолжают решения (7а) и (7с). Следовательно, эти области не содержат качественно иных решений, чем область $|1 - q| < 1$.

В зависимости от знака параметра

$$\varepsilon = \pi\beta^3/(24\gamma^2a) - 1 \quad (8)$$

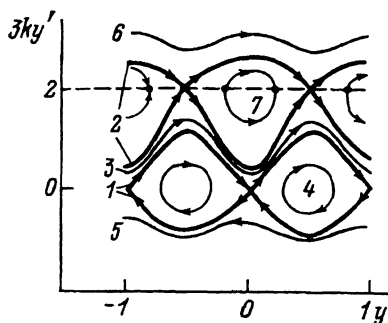


Рис. 2. Фазовые траектории при $\epsilon > 0$.

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 растяжение, 7 — $(a\epsilon/\pi) < E < \beta^3/(24\gamma^2)$.

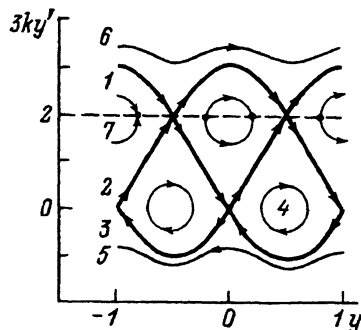
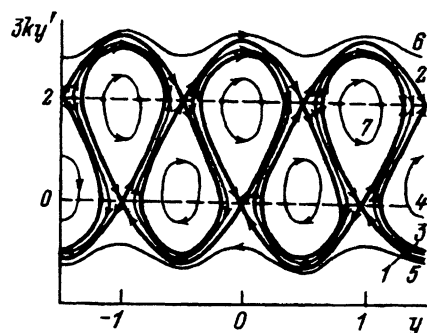


Рис. 3. Фазовые траектории при $\epsilon = 0$.

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. 4. 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 — $0 < E < \beta^3/(24\gamma^2)$.



фазовый портрет модели, описываемой уравнениями (7), различен (см. рис. 2, 3, 4) соответственно для $\epsilon > 0$, $\epsilon = 0$, $\epsilon < 0$. Различные типы фазовых траекторий разделены сепаратрисами (жирные кривые 1, 2 на рис. 2, 4, из которых 1 отвечает значению $E = 0$, а 2 — $E = E_c \equiv a\epsilon/\pi$). При $\epsilon = 0$ (рис. 3) все сепаратрисы 1, 2, 3 отвечают значению $E = E_c \equiv 0$. Стрелками отмечены возможные направления движения. При $3ky' > 0$ направлению стрелок в сторону увеличения величины y . При $3ky' < 0$ их направление противоположно. При $\epsilon > 0$ (рис. 2) в промежутке между сепаратрисами 1 и 2 при $0 < E < E_c$ и $3ky' > 0$ возможны незамкнутые фазовые траектории 3, описывающие решетку солитонов растяжения. Траекториям с $-a/\pi \leq E < 0$ отвечают замкнутые кривые 4 (рис. 2, 3, 4), описывающие циклическое движение изображающей точки. При $0 < E < \infty$ и $3ky' < 0$ имеют место незамкнутые фазовые траектории 5 (рис. 2, 3, 4), описывающие решетку солитонов сжатия. Решения 2, 6, 7 (рис. 2) и 1-3, 6, 7 (рис. 3, 4) своим существованием обязаны ангармонизму и практически не изучены. Решения 1, 3 (рис. 2) и 4, 5 (рис. 2, 3, 4) существуют в модели Френкеля-Конторовой [1], и далее мы изучим поправки к ним, вносимые ангармонизмом.

Если можно ограничиться случаем $3ky' \ll 1$ и использовать разложения в ряд Тейлора функций \arccos , \cos и \sin , то можно из точного выражения (7a,b) получить приближенное решение

$$y' = \pm(2(E + g)/\beta)^{1/2} + 3k^2(E + g)/(4\gamma), \quad (9)$$

в котором знак плюс отвечает растяжению, а минус — сжатию и второе слагаемое является ангармонической поправкой.

Из формулы (9) в первом приближении следует, что профиль волны в ангармонической цепочке описывается выражением

$$n(y) = \alpha n_{\text{ФК}} - ky(n)/2,$$

$$n_{\text{ФК}} = \pm \int_0^y (2(E + g(y)))^{-1/2} (1 - \nu)^{1/2} dy, \quad \alpha = |\beta/(1 - \nu)|^{1/2}. \quad (10)$$

В этом выражении $n_{\text{ФК}}(y)$ описывается профиль волны в модели Френкеля–Конторовой. Коэффициент перед ним α и второе слагаемое в правой части учитывают влияние ангармонизма. Продифференцируем (10) по y и, имея в виду, что $y' = (dn/dy)^{-1}$ является мерой деформации, получим

$$(y')^{-1} = \alpha(y'_{\text{ФК}})^{-1} - k/2, \quad (11)$$

где $k = 4\gamma/(3\beta)$ и $y'_{\text{ФК}}$ — профиль деформации, вычисленный без учета ангармонизма. Из выражений (10) и (11) следуют выводы о влиянии ангармонизма цепочки на профиль волны. Предположим, что цепочка и подложка соизмеримы ($\alpha = 1$). Тогда влияние ангармонизма определяется вторым слагаемым в правой части выражений (10) и (11). Данное слагаемое пропорционально константе ангармонизма γ и его знак зависит от того, какие рассматриваются волны: дозвуковые ($\nu < 1$) или сверхзвуковые ($\nu > 1$).

Из (11) следует, что для дозвуковых волн (в том числе статических) участки растяжения цепочки (где $y' > 0$) под влиянием ангармонизма укорачиваются, а величины деформации растяжения y' при этом растут. Участки сжатия (где $y' < 0$) удлиняются, а деформации сжатия по абсолютной величине под влиянием ангармонизма уменьшаются. Для сверхзвуковых волн влияние ангармонизма противоположное.

В случае одиночного солитона ($E = 0$, $\nu < 1$) получаем из (10) выражение для ширины солитона $l_0 \equiv l/y'_{\text{max}}$

$$l_0 = \alpha L \pm k/2, \quad L = (\pi\beta/(2\alpha))^{1/2}, \quad (12)$$

где L — ширина солитона в модели Френкеля–Конторовой [1], знак минус соответствует растяжению, а плюс — сжатию. В соизмеримом случае ($\alpha = 1$) ангармоническая поправка, равная слагаемому $k/2$, показывает, что солитон сжатия с ростом величины постоянной ангармонизма расширяется, а солитон растяжения — сжимается.

Эти результаты имеют следующее качественное объяснение. Если в соизмеримой системе убрать один атом, то ангармоническая цепочка, являясь более мягкой при растяжении, чем при сжатии, на меньшей

длине цепи придет в соответствие с подложкой. И наоборот, добавление атома в более жесткую при сжатии ангармоническую цепочку приводит к более протяженному, чем в гармоническом случае, распределению области сжатия по длине цепочки.

Учет ангармонизма дает помимо обычных для модели Френкеля-Конторовой решений сжатия (7а) и растяжения (7б) третью ветвь решений (7с), существующую при $E \leq \beta^3/(24\gamma^2)$. При $-\infty < E < E_c$ ветвь закритических растяжений (7с) описывается фазовой траекторией δ (рис. 2, 3, 4), которая является замкнутой, как и фазовая траектория докритического растяжения (7б) (кривая \mathcal{Z} на рис. 2).

При $E = E_c$ фазовые траектории до- и закритического растяжения вместо соответствующего максимума и минимума ($y = \pm 1/2, \pm 3/2 \dots$) при $3ky' = 2$ сливаются и образуют сепаратрисы \mathcal{Z} . При $\varepsilon > 0$ (рис. 2) они сдвинуты относительно друг друга на половину своего периода и состоят каждая из решений (7б) и (7с). Они отличаются удвоенным периодом по сравнению с обычным для модели Френкеля-Конторовой (кривая \mathcal{Z} на рис. 2) периодом незамкнутых фазовых траекторий. При $\varepsilon = 0$ (рис. 3) все сепаратрисы сливаются при $E = E_c \equiv 0$, описывая фазовую траекторию солитона с топологическим зарядом — суммарным смещением, равным двум (сепаратриса \mathcal{Z} от $y = -1$ до $y = 1$, рис. 3). При $\varepsilon > 0$ (рис. 2) сепаратриса \mathcal{Z} описывает решетку таких солитонов.

По определению (8), величина ε зависит как от параметров потенциалов a и γ , так и от фазовой скорости v (через величину $\beta(v)$). Отсюда следует, что при изменении фазовой скорости v возможен переход при $\varepsilon = 0$ от одного типа фазового портрета, описывающего солитоны, к другому, в котором траекторий, описывающих солитоны растяжения, нет. Сепаратрисы $1, 2, 3$ (рис. 3) описывают солитон растяжения, бегающий с максимально возможной при данных параметрах потенциалов скоростью

$$v_c = c \left(1 - (24\alpha\gamma^2/\pi)^{1/3} - 2\gamma t \right)^{1/2}, \quad (13)$$

при которой обычный солитон растяжения превращается в солитон с удвоенным топологическим зарядом. Солитон сжатия качественных изменений не претерпевает.

При описании солитона в системе с критическими значениями параметров ($\varepsilon = 0$, рис. 3) уравнения сепаратрис (7) упрощаются,

$$3ky' = 1 + 2 \cos(2\pi(y + j)/3), \quad j = +1, 0, -1. \quad (14)$$

Выражения (14) описывают сепаратрисы $1, 2, 3$ (рис. 3) соответственно. Из них следуют выражения для профиля соответствующего критического кинка растяжения с топологическим зарядом, равным двум,

$$y = (3/\pi) \operatorname{arctg} \left(\sqrt{3} \operatorname{th}(n\pi/(2L)) \right) \quad (15)$$

и профиля соответствующего ему по величине E (сепаратриса 1 от $y = 1$ до $y = 0$ на рис. 3) антикинка сжатия, для которого данная величина скорости не является критической,

$$y = (3/\pi) \operatorname{arccctg} \left((2 \exp(n\pi/L) + 1)/\sqrt{3} \right), \quad (16)$$

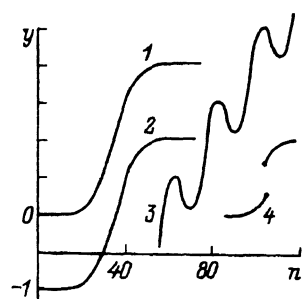


Рис. 5. Волновые решения при $\gamma = 5$.

1, 2 — солитоны с топологическим зарядом равным двум, соответствующие сепаратрисе (9), 3 — волна, соответствующая спиралевидной сепаратрисе 2' на рис. 4, 4 — солитон растяжения, описываемый фазовой траекторией 1 на рис. 4, с разрывом в критической точке.

где величина $L = (\beta_c \pi / (2a))^{1/2} = (\sqrt{3} \gamma \pi / a)^{1/3}$ формально равна ширине солитона в модели Френкеля-Конторовой (12) с критическим параметром скорости $\beta_c = (24 \alpha \gamma^2 / \pi)^{1/3}$. Число закритически деформированных связей солитона растяжения равно $(L \ln 4)$. Решением (14) является также любой волновой профиль 1 на рис. 5, полученный сдвигом на этом рисунке профиля 2, отвечающего решению (15), по оси y на целочисленную величину.

Мерой ширины солитона L_1 (по аналогии с солитоном Френкеля-Конторовой) может служить величина, обратная максимальной деформации в волне y'_{\max} , с учетом топологического заряда $y(\infty) - y(-\infty)$ солитона

$$L_1 = (y(\infty) - y(-\infty)) / y'_{\max}. \quad (17)$$

Согласно (14), для кинка растяжения она меньше величины L ,

$$L_1 = 4(\gamma \pi / (3a))^{1/3} / 3. \quad (18)$$

Для кинка сжатия той же скорости она составляет величину

$$L_2 = 2(\gamma \pi / (3a))^{1/3}. \quad (19)$$

Видно, что критический кинк растяжения с топологическим зарядом, равным двум, короче соответствующего обычного антикинка. Ширина солитона растяжения с топологическим зарядом, равным двум, увеличивается с ростом постоянной ангармонизма γ и убывает с увеличением относительной амплитуды внешнего гармонического потенциала a .

Аналитический вид (15) кинка с топологическим зарядом, равным двум, аналогичен с точностью до числовых коэффициентов решению двойного уравнения Синус-Гордона [13], описывающего другие теоретические модели.

Энергия критического солитона растяжения с топологическим зарядом, равным двум, при соизмеримых периодах цепочки и подложки есть

$$e = (3a / (\pi \gamma))^{1/3} \left(1 + 3\sqrt{3} / (2\pi) \right) - (9a^2 \gamma / \pi^2)^{1/3} \left(1 + 9\sqrt{3} / (8\pi) \right). \quad (20)$$

При $\epsilon \gg 1$ сепаратриса 2 на рис. 2 с деформацией, близкой к критической, приближенно описывается уравнением вида

$$2 - 3ky' = \pm 2(3\epsilon + 3)^{-1/2} \cos(\pi y). \quad (21)$$

Из него находим волновые профили двух решеток солитонов

$$y = (2/\pi) \operatorname{arctg} \left[\left((1 - (3\varepsilon + 3))^{-1/2} \right) / \left(1 + (3\varepsilon + 3)^{-1/2} \right)^{\pm 1/2} \operatorname{tg}(\pi n/l) \right] \quad (22)$$

где l — период решетки таких солитонов есть

$$l = 2 \left(\gamma \pi (3\varepsilon + 3)^{1/2} / a \right)^{1/3} / (3\varepsilon + 2)^{1/2}. \quad (23)$$

При $\varepsilon < 0$ (рис. 4) возможна одна непрерывная сепаратриса 2, которая отделяет замкнутую 4 ($-a/\pi < E < E_c$) и незамкнутую 6 ($-\infty < E < E_c$) непрерывные траектории от траекторий 1,3,7 с разрывом в критической точке ($3ky' = 2$). Сепаратриса 2 отвечает бегущей волне 3 на рис. 5, в которой при чередовании сжатия и растяжения смещение растяжения нарастает.

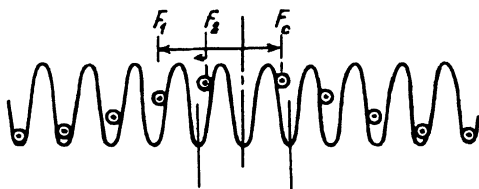
Для каждого из рассмотренных случаев $\varepsilon > 0$, $\varepsilon = 0$, $\varepsilon < 0$ (рис. 2, 3, 4) при специальном выборе параметров потенциалов a и γ сепаратриса 2 описывает также статическую конфигурацию смещений ($\beta = 1$). Силы связей справа и слева от атома в точке $y = \pm 1/2, \pm 3/2 \dots$ в такой структуре равны, а деформации могут быть как до-, так и закритическими. При этом возможен переход в критической точке ($3ky' = 2$) с траектории на траекторию. При $\varepsilon \geq 0$ комбинация участков сепаратрис 2 дает решетку солитонов или солитон с целочисленным топологическим зарядом, в том числе равным единице (рис. 2, 3). При $\varepsilon < 0$ (рис. 4) изображающая точка может вернуться при $y = \pm 1/2; \pm 3/2$ на пройденный ею участок сепаратрисы 2, что не приводит к суммарному растяжению цепочки на отрезке описываемых траекторией 2 смещений. Пересечение сепаратрисой 2 самой себя, кроме того, говорит о возможности нерегулярного поведения изображающей точки.

Непрерывное движение по траекториям 7 (рис. 2, 3) и 1, 3, 7 (рис. 4) невозможно (см. направление стрелок), и ему не соответствует какая-либо конфигурация цепочки в континуальном приближении.

Например, сепаратриса 1 (рис. 4) с разрывом в критической точке могла бы описать солитон 4 (рис. 5). На рис. 5 показаны две докритические ветви 4 такого солитона ($E = 0$) растяжения $y(n)$ с разрывом при критической деформации. Возможная схема расположения атомов вблизи разрыва функции смещений $y(n)$ для этого солитона представлена на рис. 6. Аналогичным образом выглядел бы вблизи точки разрыва любой другой волновой профиль. Между симметричными участками нарастания и спада докритических растяжений связей расположена центральная критически растянутая связь. Предположим,

Рис. 6. Схема расположения атомов солитона с разрывом в критической точке.

Сила F_c критического растяжения связи уравновешена силой F_1 докритического растяжения соседней связи и силой F_2 , действующей со стороны периодического потенциала подложки.



что существует статическая структура, которая описывается со скачками смещения $y(n)$ и переходами с одной траектории на другую в критической точке y_c

$$y_c = (1/\pi) \arcsin(B), \quad B = (1 + \varepsilon - \pi E/a)^{1/2}. \quad (24)$$

После точки разрыва изображающая точка движется в положительном по y направлении на верхней или нижней дуге каждой последующей траектории γ (рис. 2, 3) или $1, 3, 7$ (рис. 4). Деформации изменяются непрерывно, и между атомами со смещениями, равными y_c и $1 - y_c$, связь критически деформирована. Этим условием детерминировано единственное значение постоянной E

$$E = \beta^3 / (24\gamma^2) - (a\pi) \cos^2(\pi/(4\gamma)). \quad (25)$$

Из траекторий типа γ на рис. 2 или $1, 3, 7$ рис. 4 возможна одна.

При $\varepsilon \gg 1$ траектория γ (рис. 2; 3) приближенно отвечает уравнению

$$((2 - 3ky')/A)^2 + (\sin(\pi y)/B)^2 = 1, \quad (26)$$

где $A = 4\gamma (2(\beta^3/(24\gamma^2) - E)/\beta^3)^{1/2}$ — большая полуось эллипса γ (рис. 2), а величина B из (24) — его малая полуось. Уравнение (26) позволяет сделать оценку числа атомов цепочки, описываемых участком фазовой траектории от $y = 0$ до точки разрыва $y = y_c$, которое равно $2\gamma y_c / (1 - 2\gamma t)$. Аналогичная оценка следует для числа атомов участка сепаратрисы 1 (рис. 4), отвечающей солитону 4 (рис. 5).

Описание атомной структуры фазовой траекторией возможно, если число точек на ней, отвечающих реальным смещениям атомов цепочки, существенно больше единицы, что возможно при $\gamma \gg 1$. Учитывая это условие в выражении (25), находим, что данные фазовые траектории отвечают реальным атомным структурам только в предельном случае $E \rightarrow E_c$, т.е. когда они асимптотически близки к сепаратрисе 2 (рис. 2, 3, 4). Поэтому существование так называемых «искаженных волн» [7] в нашем случае невозможно.

Таким образом, для ангармонической цепочки в модели Френкеля–Конторовой аналитически исследованы решения уравнения движения типа бегущих волн. Учет ангармонизма цепочки дает помимо двух известных в гармонической модели Френкеля–Конторовой решений (сжатия и растяжения) третью ветвь при закритических растяжениях. В фазовом портрете рассмотренной ангармонической модели возникает сепаратриса 2 (рис. 2, 3, 4), неизвестная в модели Френкеля–Конторовой. Существует предел фазовой скорости солитона растяжения, при которой обычный солитон растяжения превращается в солитон с удвоенным топологическим зарядом. Его энергия при данной скорости не обращается в бесконечность, как это происходит в модели Френкеля–Конторовой при приближении фазовой скорости к скорости звука. Его ширина растет при увеличении постоянной ангармонизма. Для обычных волн модели Френкеля–Конторовой дозвуковых скоростей участки, на которых происходит растяжение, под влиянием ангармонизма укорачиваются, а участки деформации сжатия, наоборот, удлиняются. Для волн, фазовая скорость которых превышает величину скорости звука, влияние ангармонизма противоположное.

Список литературы

- [1] Френкель Я.И., Конторова Т.А. // ЖЭТФ. 1938. № 8. С. 89–97.
- [2] Frank F.C., Van der Merwe J.H. // Proc. Roy. Soc. A. 1949. V. 198. P. 205–215.
- [3] Bak P. // Rep. Prog. Phys. 1982. V. 45. P. 589–629.
- [4] Theodorow G., Rice T.M. // Phys. Rev. B. 1978. V. 18. N 6. P. 2840–2856.
- [5] Покровский В.Л., Талапов А.Л. // ЖЭТФ. 1978. Т. 75. № 3. С. 1151–1157.
- [6] Мелькер А.И., Говоров С.В. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 12. С. 3597–3604.
- [7] Milchev A. // Physica D. 1990. V. 41. N 2. P. 262–274.
- [8] Marianer S., Bishop A.R., Pouget J. // Competing interact and Microstruct. Statics and Dynamics: Proc. CMS Workshop. LosAlamos, N.M. May 5–8 1987 — Berlin ect. 1988. V. 27. P. 104–109.
- [9] Markov I., Trayanov A. // J. Phys. C. 1988. V. 21. P. 2475–2493.
- [10] Pnevmatikos St., Flytzanis N., Bishop A.R. // J. Phys. C. 1987. V. 20. P. 2829–2851.
- [11] Kosevich A.M., Kovalev A.S. // Solid State Commun. 1973. V. 12. P. 763–765.
- [12] Гиляров В.Л. // ФТТ. 1987. Т. 29. № 4. С. 1055–1059.
- [13] Kitchenside P.W., Caudrey P.J., Bullough R.K. // Phys. Scripta. 1979. V. 20. P. 673–680.