

УДК 539.21 : 678.01

© 1990

СОЛИТОНЫ И ДИЛАТОНЫ В ЦЕПОЧКЕ МОРЗЕ

С. А. Беклемишев, В. Л. Клочихин

Аналитически исследованы решения уравнения движения в виде бегущих волн для одномерной модели твердого тела с парным потенциалом взаимодействия Морзе. Принципиально новым при их получении является использование преобразования дуальности Тоды. Найдены решения типа солитонов. Показана невозможность существования уединенных волн растяжения. Полученные решения качественно отличаются от результатов предыдущих работ в области закритических деформаций цепочки. Результаты проверены с помощью моделирования динамики решетки на ЭВМ.

Согласно молекулярно-кинетической теории прочности Журкова [1], разрыв нагруженной связи происходит вследствие ангармонических термофлуктуаций. Статистический подход к разрушению ангармонической цепочки в температурно-силовом поле с учетом ее теплового расширения и размягчения рассмотрен в [2-5].

Изучение динамики и численное моделирование на ЭВМ различных термофлуктуаций, предшествующих разрушению [6-8], выявили, по мнению авторов, солитоноподобный характер этих колебаний.

Исследование волн ангармонической цепочки для различных потенциалов обычно требует использования континуального приближения. В работе Бадати [9] решена задача о динамике ангармонической цепочки в континуальном приближении для смещений атомов с точностью до члена с 4-й производной включительно с учетом ангармонизма межатомного потенциала 3-й и 4-й степеней. Аналогичная задача в присутствии внешней растягивающей силы решена в [10, 11]. В работе [12] задача решена в континуальном приближении для смещений атомов с точностью более высокого порядка (до 5-й производной), чем в [10, 11], а межатомный потенциал моделировался полиномом 5-й степени.

Реалистический межатомный потенциал типа Морзе с учетом приложенной растягивающей нагрузки имеет два экстремума: минимум и максимум, за которым следует разлетная часть потенциала. Данный потенциал передается качественно верно полиномом 3-й степени (за исключением разлетной области деформаций, в которой реальная зависимость должна приближаться к линейной). Аппроксимация полиномом 4-й степени [10] улучшает сходимость, но затем, с ростом деформации, приводит к нефизическим эффектам: появлению в закритической области фиктивного второго минимума и невозможности разрыва связи [11]. Использование полинома 5-й степени вновь делает возможным разрыв связи, но уже в области больших закритических деформаций [12], где разумность поведения потенциала проблематична. В связи с этим становится весьма актуальной задача нахождения колебательных мод цепочки с реалистическим видом межатомного потенциала во всем интервале деформаций.

Для решения данной задачи можно использовать метод, развитый Тодой [13]. Предложенное им преобразование дуальности позволяет решить задачу, используя точный потенциал межатомного взаимодействия.

В настоящей работе преобразование дуальности применено для расчета динамики цепочки с реалистическими потенциалами типа Морзе. Перемен-

ной в задаче является профиль нагрузки. Для него использовано континуальное приближение в виде ряда по четным степеням постоянной решетки. Членами ряда с 6-й и производными более высокого порядка пренебрегали. Это по точности соответствует разложению профиля смещений атомов из положения равновесия в ряд до 5-й производной включительно [12].

Многие реалистические ангармонические потенциалы таковы, что сила взаимодействия атомов P с учетом внешней растягивающей нагрузки $F > 0$ есть

$$P(\varepsilon) = -4bF_{кр}(\theta q^2(\varepsilon) - q(\varepsilon)) + F, \quad (1)$$

ε — деформация связи, длина которой при отсутствии внешних нагрузок h_0 ; $F_{кр}$ — максимальная критическая сила. В случае потенциала Морзе $q(\varepsilon) = \exp(-\gamma\varepsilon)$, $F_{кр} = -D\gamma/2h_0$, где D — энергия диссоциации связи; γ — параметр потенциала, отвечающий за его кривизну в точке минимума. В случае потенциалов Ми со степенями h , $(2n+1) q(\varepsilon) = (1+\varepsilon)^{-(n+1)}$, $n=1, 2, 3, \dots$, $F_{кр} = -Dbn/4h_0^{(n+1)}$, b — параметр потенциала. θ — параметр ангармонизма, в случае кубического потенциала $q(\varepsilon) = \varepsilon$, $F_{кр} = -h_0k/4\theta$, k — параметр жесткости, в других случаях $\theta = 1$.

Введем обозначение безразмерной силы [14]

$$z \equiv \theta q^2(\varepsilon) - q(\varepsilon) \equiv (F - P(\varepsilon))/4F_{кр}\theta. \quad (2)$$

Всякой силе, меньшей критической $F_{кр}$, соответствуют два значения деформации: докритическая ε^+ и закритическая ε^- , которые в неявном виде выражаются через величину z , $q(\varepsilon^\pm) = W^\pm/2\theta$, $W^\pm = 1 \pm \sqrt{1 + 4\theta z}$. Отсюда следует критерий прочности статически растянутой цепочки как целого $z \geq -1/4$, $F \leq -F_{кр}$.

Уравнение движения для цепочки атомов имеет вид

$$m\ddot{Y}_n = P(\varepsilon_n) - P(\varepsilon_{n+1}), \quad (3)$$

$\varepsilon_n = (Y_n - Y_{n-1})/h_0 - 1$; Y_n — координата n -го атома; m — масса атома. Согласно [13], уравнения движения (3) могут быть проинтегрированы и переписаны в виде

$$mh_0\dot{\varepsilon}_n = -(S_{n+1} + S_{n-1} - 2S_n), \quad (4)$$

где S_n — обобщенный импульс, такой, что его производная по времени

$$\dot{S}_n = P(\varepsilon_n). \quad (5)$$

Решение системы (4) будем искать в виде бегущих волн $S_{n\pm 1}^{(t)} = S_n(t \pm \tau)$ со скоростью V , где $\tau = h/V$, $h = h_0(1 + \varepsilon_n)$, ε_n — величина деформации статически растянутой цепочки, такая, что $q(\varepsilon_n) = (1 + \sqrt{1 + F/F_{кр}})/2\theta$. Раскладывая $S(t \pm \tau)$ по степеням τ и ограничиваясь четвертой степенью разложения, интегрируем (4) и получаем

$$mh_0\dot{\varepsilon}_n = -\tau^2(\dot{S} + \tau^2\ddot{S}/12) + mh_0\varepsilon_n. \quad (6)$$

Используя (1), (2), (5) для подстановки в (6), а также волновое уравнение $\ddot{z} = V^2 z''$, находим выражение

$$Mz'' = f^\pm(z), \quad (7)$$

аналогичное уравнению Ньютона для «частицы» с координатой z , массой $M = h^2\beta/12$, $\beta = -F_{кр}4\theta\tau^2/mh_0 > 0$ и силой $f^\pm(z) = -(\varepsilon^\pm(z) + \beta z + k)$, $k = Fh^2/(mV^2h_0) - \varepsilon_n$.

На рис. 2 для случая потенциала Морзе изображены графики кривой $y = -\varepsilon^\pm(z)$ и прямой $y = \beta z + k$, разность которых дает силу $f^\pm(z)$. Чем больше тангенс наклона β прямой $y = \beta z + k$, тем меньше скорость V соответствующей волны, и наоборот. Прямая $y = \beta z + k$ в общем случае может пересекать кривую $y = -\varepsilon^\pm(z)$ в двух точках, которым соответствуют два

возможных положениях равновесия. При выполнении условий $k < -\varepsilon_c$ или $k > -\varepsilon_c$ и $\beta > 4(\varepsilon_c + k)$ прямая пересекает кривую в одной точке докритических (верхняя ветвь) деформаций. Обе эти точки являются точками устойчивого равновесия. Если $k > -\varepsilon_c$ и $\beta < 4(\varepsilon_c + k)$, то обе точки лежат на верхней (докритической) ветви зависимости $y = -\varepsilon^+(z)$, причем левая точка является точкой неустойчивого, а правая — устойчивого равновесия. Тангенс наклона касательной к кривой $y = -\varepsilon^+(z)$ в точке равновесия $\beta_{zb} = -\varepsilon'(F/F_{кр})$ определяет скорость звука в деформированной $\varepsilon_n = \varepsilon(F/F_{кр})$ цепочке. Для ненагруженной цепочки $\beta_{zb} = -\varepsilon'(0)$, и легко видеть, что в этом случае для потенциала Морзе $\gamma\beta_{zb} = 1$, откуда скорость звука есть $c = \gamma\sqrt{2D/m}$.

Положения равновесия «частицы» ($f^\pm(z) = 0$) описывают все состояния статически деформированного кристалла. Так, прямая $y = \beta z + k$, пересекающая ось ординат ниже ($k < 0$) точки $\varepsilon = 0, z = 0$, в точке устойчивого

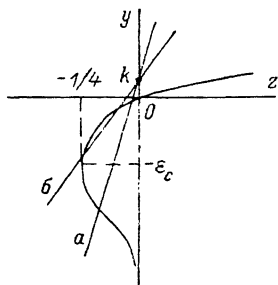


Рис. 1. Составляющие силу $f^\pm(z) = y_1 - y_2$ зависимости $y_1 = -\varepsilon(z), y_2 = \beta z + k$.
 $-\beta > 4(\varepsilon_c + k), \beta > 4(\varepsilon_c + k)$ (а); $-\beta < 4(\varepsilon_c + k)$ (б); $-\beta > 4(\varepsilon_c + k)$ (б).

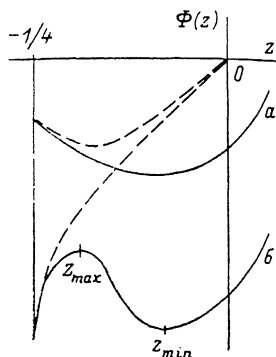


Рис. 2. Потенциал $\Phi^\pm(z)$ при $k > -\varepsilon_c$.
 $-\beta > 4(\varepsilon_c + k)$ (а), $-\beta < 4(\varepsilon_c + k)$ (б). Штриховая линия — закрытая ветвь потенциала $\Phi^-(z)$.

равновесия отвечает сжатой ($\varepsilon_n < 0, z_n = F/F_{кр} > 0$) цепочке, а в точке неустойчивого равновесия — растянутой цепочке ($\varepsilon_n > 0, z_n = F/F_{кр} < 0$). Если прямая пересекает ось ординат выше ($k > 0$) точки $\varepsilon = 0, z = 0$, то в случае волн, бегущих со скоростями, меньшими скорости звука недеформированной цепочки ($V < c$), оба положения равновесия отвечают статически растянутым связям, а в случае волн, бегущих с большими скоростями ($V > c$), — сжатым связям.

Интеграл уравнения движения (7) дает уравнение фазовых траекторий

$$z'^2/2 + \Phi^\pm(z) = E, \quad (8)$$

$$\Phi^\pm(z) = (12/\hbar^2\beta) \left(\beta z^2/2 + kz + \int \varepsilon^\pm(z) dz \right),$$

где константа интегрирования E соответствует полной энергии «частицы» единичной массы, колеблющейся в потенциале $\Phi^\pm(z)$. Для цепочки Морзе найденный потенциал

$$\Phi^\pm(z) = (12/\hbar^2\beta) \left(\beta z^2/2 + kz + z \ln 2 \right) / \gamma - (4z \ln W^\pm - (W^\pm)^2/2 + 2W^\pm) / 4\gamma$$

показан на рис. 2. Рассмотренным выше двум случаям пересечения прямой и кривой на рис. 1 отвечают два типа потенциала $\Phi^\pm(z)$ (рис. 2, а, б).

В случае $k < -\varepsilon_c$ или $k > -\varepsilon_c$ и $\beta > 4(\varepsilon_c + k)$ воображаемая частица совершает периодические движения в одной из двух потенциальных ям (рис. 2, а), что соответствует бегущим кноидальным волнам в докритически и закрыто критически растянутых цепочках.

Наибольший интерес представляет случай $k > -\varepsilon_c$ и $\beta < 4$ ($\varepsilon_c + k$), в котором потенциал $\Phi^\pm(z)$ имеет как минимум, так и максимум (рис. 2, б). Известно, что в подобного вида потенциалах возможны решения типа солитонов [15]. При этом воображаемая «частица», бесконечно долго покоившаяся в точке максимума потенциала, скатывается, например, вправо в направлении минимума, минуя его, поднимается до точки поворота, а затем возвращается в первоначальное положение, где опять останавливается. Такой тип движения «частицы» отвечает решению типа уединенной волны сжатия в ангармонической цепочке. Аналогичным образом воображаемая «частица» скатывается влево, отражается в точке $z = -1/4$, соответствующей критической деформации, и поднимается по закритической ветви потенциала до точки поворота, а затем прежним путем возвращается в первоначальное положение. Этот тип движения «частицы», следуя терминологии, принятой в работах [10, 12, 16], отвечает уединенной волне растяжения, названной закритическим дилатоном.

Отвечающий скорости солитона наклон секущей (рис. 1) всегда меньше наклона касательной, проведенной в той же точке равновесия. Поэтому во всех случаях солитоны бегут быстрее скорости звука деформированной цепочки. Малые колебания «частицы» вблизи минимума потенциала практически отвечают гармоническим волнам (рис. 2). При возрастании амплитуды они переходят в кноидальные, а затем — в уединенную волну сжатия, бегущую по кристаллу с новым периодом решетки, соответствующим максимуму потенциала. Последняя волна максимальной амплитуды из волн, бегущих со скоростью, меньшей скорости звука в цепочке с деформацией $\varepsilon(z_{\min})$, — это сверхзвуковой солитон в решетке с деформацией $\varepsilon(z_{\max})$. Если амплитуду солитонов характеризовать расстоянием по z между точками равновесия, то скорость всех солитонов с одинаковой по z амплитудой падает с увеличением растягивающей нагрузки в отличие от [11].

Наибольшая деформация связи в цепочке определяется значением $z_{\text{пов}}$ в точке поворота, в которой полная энергия частицы E равна потенциальной $\Phi(z_{\text{пов}})$. Деформации всех последующих связей определяются, согласно (8), величинами z из выражения

$$n(z) = \int_{z_{\text{пов}}}^z dz / (h \sqrt{2(E - \Phi^\pm(z))}), \quad (9)$$

где $n(z)$ — номера связей по порядку от максимально деформированной.

В континуальном приближении имеют смысл те решения, для которых формула (9) дает ширину солитона l на полувысоте много больше единицы. Для солитонов сжатия, ограничиваясь 2-й степенью разложения потенциала $\Phi^+(z)$ вблизи минимума, получаем

$$l \approx (\pi/\sqrt{12}) \sqrt{\beta/(\beta - \beta_0)}, \quad \beta_0 = -\varepsilon'(z_{\min}), \quad (10)$$

причем всегда $\beta > \beta_0$. Ширина солитона неограниченно растет по релятивистскому закону, если его скорость приближается к скорости звука ($\beta \rightarrow \beta_0$) в цепочке с деформацией $\varepsilon(z_{\min})$. Континуальное приближение для солитонов сжатия пригодно при $\sqrt{1 - \beta_0/\beta} \ll 1$.

Формула (9) позволяет оценить число закритически деформированных связей для предполагаемой уединенной волны растяжения. Ограничиваясь 1-й степенью разложения потенциала $\Phi^-(z)$ вблизи точки поворота $z_{\text{пов}}$, определяем число закритически деформированных связей

$$l = 2\sqrt{2} \sqrt{z_{\text{пов}} + 1/4} / (h \sqrt{\Phi'(z_{\text{пов}})}). \quad (11)$$

Оказалось, что при любых значениях параметров β и k величина $l \ll 1$, что исключает возможность существования солитонов закритического растяжения (или дилатонов [10]) в нашей модели. Полученные ранее решения в виде уединенных волн закритического растяжения [10, 12],

по-видимому, являются следствием использования полных потенциальных, имеющих нефизические особенности в закритической области. Для кубической зависимости, качественно верно описывающей реалистичский потенциал без фиктивных экстремумов в закритической области, возможно существование солитонов сжатия, но невозможно существование одновременно с этим дилатонов [9, 11].

Использование континуального приближения с более высокой, чем в [9-11], точностью показывает, что вблизи критической точки ϵ_c волна деформации имеет особенность. Действительно, если в выражении (8) перейти от переменной z к переменной ϵ , то уравнение фазовых траекторий примет вид

$$\epsilon'^2/2 + \Psi(\epsilon) = 0, \\ \Psi(\epsilon) = \begin{cases} (\Phi^+(z(\epsilon)) - E)/(dz/d\epsilon)^2, & \epsilon < \epsilon_c, \\ (\Phi^-(z(\epsilon)) - E)/(dz/d\epsilon)^2, & \epsilon > \epsilon_c. \end{cases} \quad (12)$$

Отличительной чертой потенциала $\Psi(\epsilon)$ является разрыв второго рода при критической деформации ϵ_c (рис. 3), вблизи которой $(dz/d\epsilon) \rightarrow 0$.

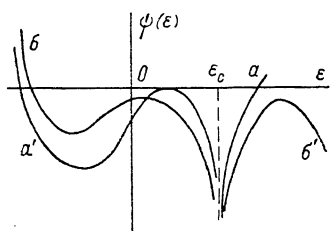


Рис. 3. Потенциал $\Psi(\epsilon)$ при $-E < \Phi^-(0)$ (а), $-E > \Phi^-(0)$ (б).

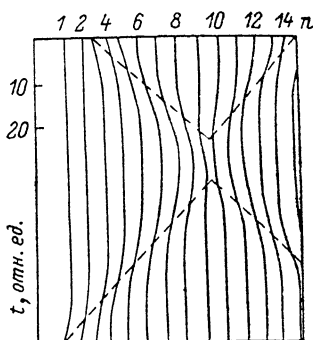


Рис. 4. Перемещение солитонов ($\beta = 0.7$ и 0.8) по цепочке Морзе навстречу друг другу в зависимости от времени.

По оси абсцисс отмечены номера атомов цепочки n (часть чисел опущена). Единица времени $0.2h\sqrt{m}/2D$. Штрихи — траектории солитонов.

В работах [9-11] полюс потенциала отсутствовал. В них использовано разложение профиля волны смещений атомов в ряд Тейлора с точностью до члена с 4-й производной, что не позволяет передать данную особенность.

В работе [12] использовано континуальное приближение более высокого порядка (до 5-й производной), а колебания цепочки описаны движением «частицы» переменной массы. Особенности, связанные с переменностью массы «частицы», которой соответствует величина $(dz/d\epsilon)^2$ в формуле (12), и возможностью обращения ее в нуль, в [12] не исследованы. Следует отметить также, что деформация ϵ в формуле (2) не совпадает с 1-й производной смещения атомов цепочки, вычисленной в [12].

Полная энергия «частицы», двигающейся в потенциале $\Psi(\epsilon)$, равна нулю, поэтому ее фазовая траектория заключена в интервале значений ϵ , в котором функция $\Psi(\epsilon) \leq 0$. Движение «частицы» в закритической области при $E < \Phi^-(0)$ ограничено точкой поворота $\Psi(\epsilon_{пов}) = 0$ (рис. 3, а) или $\Phi^-(z_{пов}) = E$ (рис. 2, б). Один из типов такого движения — солитон закритического растяжения — невозможен (см. выше). В общем случае — это нелинейные волны, в которых сжатие чередуется с закритическим растяжением.

Существование связанной цепочки становится невозможным при достижении точки $z=0$ на закритической ветви потенциала $\Phi^-(z)$ «частицы».

имеющей энергию $E \geq \Phi^-(0)$ (рис. 2, б). В этом случае $\Psi(\varepsilon) < 0$ и точки поворота «частицы» в закритической области нет (рис. 3, б).

Для того чтобы убедиться в том, что найденная уединенная волна сжатия удовлетворяет известным свойствам солитонов, необходимо промоделировать эволюцию начального профиля, заданного по формуле (9), на ЭВМ. Скорости атомов в цепочке вычислялись как $V_n = V_{\varepsilon_n}$. Интегрирование проводилось с помощью расчетной схемы [17] с использованием безразмерной системы единиц [8], основными из которых являлись скорость $V_0 = \gamma\sqrt{2D/m}$ и время $t_0 = h/V_0$. Шаг интегрирования $\Delta t = 2 \cdot 10^{-4} t_0$ обеспечивал сохранение полной энергии с точностью до 0.01 % в каждый момент t .

Расчет показал, что данный профиль действительно является солитоном, так как перемещается по цепочке Морзе, не изменяя формы, со скоростью $V > c$, а кинетическая энергия всей цепочки из 14–56 атомов постоянна, пока солитон не достигнет ее края. В случае двух солитонов, бегущих навстречу друг другу, в момент столкновения кинетическая энергия обращается в нуль, а затем принимает первоначальное значение. При этом солитоны проходят друг через друга без изменения формы и скорости, но со сдвигом фазы (рис. 4).

Итак, преобразование дуальности Тоды и континуальное приближение для профиля нагрузки позволили исследовать волновые решения уравнения движения цепочки атомов с реалистическим потенциалом. Показано, что при уменьшении скорости солитона сжатия до скорости звука его ширина растет по релятивистскому закону. Показана невозможность существования уединенных волн закритического растяжения. Найдены соотношения параметров β и k , при которых происходит изменение фазового портрета системы. Полученные результаты отличаются от результатов предыдущих работ [9–12], использующих полиномиальные потенциалы, в области закритических деформаций цепочки.

Список литературы

- [1] Журков С. Н., Петров В. А. // ДАН СССР. 1978. Т. 239. № 6. С. 1316–1319.
- [2] Гиляров В. Л., Пахомов А. Б. // ФТТ. 1981. Т. 23. № 6. С. 1569–1572.
- [3] Гиляров В. Л., Петров В. А. // ФТТ. 1983. Т. 25. № 2. С. 472–477.
- [4] Гиляров В. Л., Петров В. А., Сабиров Р. Х., Лукьяненко А. С. // ФТТ. 1986. Т. 28. № 5. С. 1332–1337.
- [5] Сабиров Р. Х. // ФТТ. 1984. Т. 26. № 5. С. 1358–1361.
- [6] Разумовская И. В., Зайцев М. Г. // ФТТ. 1978. Т. 20. № 1. С. 248–250.
- [7] Лагунов В. А. // ФТТ. 1985. Т. 27. № 7. С. 2175–2179.
- [8] Лагунов В. А. // ФТТ. 1986. Т. 28. № 11. С. 3466–3472.
- [9] Wadati M. // Phys. Soc. Jap. 1975. V. 38. N 3. P. 673–680.
- [10] Мелькер А. И., Иванов А. В. // ФТТ. 1986. Т. 28. № 11. С. 3396–3402.
- [11] Сабиров Р. Х. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 4. С. 167–171.
- [12] Мелькер А. И. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 11. С. 3407–3412.
- [13] Toda M. // Supplement of Progress of Theoretical Physics. 1976. N 59. P. 1–35.
- [14] Ретгель В. Р., Слуцкер А. И., Томашевский Э. Е. Кинетическая природа прочности твердых тел. М.: Наука, 1974. 560 с.
- [15] Кадомцев Б. Б. Коллективные явления в плазме. М.: Наука, 1976. 238 с.
- [16] Мелькер А. И. // ФТТ. 1982. Т. 24. № 10. С. 4086–4088.
- [17] Gibson J. B., Goland A. N., Milgram M., Vinyard G. H. // Phys. Rev. 1960. V. 120. N 4. P. 1229–1253.

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

Поступило в Редакцию
11 июля 1989 г.
В окончательной редакции
11 апреля 1990 г.