11,12

Основное состояние упругопериодической цепочки атомов в периодическом потенциале произвольной формы

© А.К. Абкарян[1], А.Ю. Бабушкин[1], Б.С. Добронец[1], В.С. Красиков[1], А.Н. Филонов[2]

[1] Сибирский федеральный университет, Институт космических и информационных технологий,
Красноярск, Россия
[2] Институт цветных металлов им. М.И. Калинина,
Красноярск, Россия
E-mail: anfilonov@rambler.ru

*(Поступила в Редакцию 23 апреля 2015 г.
В окончательной редакции 28 июля 2015 г.)*

Исследовано основное состояние упругопериодической цепочки атомов в периодическом потенциале. Построены зависимости относительного растяжения цепочки и ее потенциальной энергии от параметра несоразмерности. Точные решения отличаются от решений в континуальном приближении P-симметрией и меньшими размерами областей соразмерных фаз.

1. Введение

Основное состояние большинства физических систем низкой размерности формируется конкуренцией объемных и поверхностных сил, но имеются исключения. Уникальный пример поверхностной системы — упругопериодическая цепочка атомов (цепочка Гука). Благодаря межатомной силе Гука любое воздействие на граничный атом приводит к одинаковому изменению периода на всей цепочке. С другой стороны, цепочка Гука, помещенная во внешний потенциал с тем же периодом и амплитудой $V_0 > 1$ (упругая константа выбрана равной 1), является объемной системой. Изменение координаты граничного атома не приводит к заметным изменениям координат внутренних атомов, сгруппированных вблизи минимумов потенциала. Промежуточный случай $V_0 < 1$ из-за неоднородных решений типа дислокаций [1] сложен для анализа, но именно он самый интересный. Рассматриваются следующие модели:

1. Модель Френкеля–Конторовой (ФК-модель) — цепочка Гука во внешнем монохроматическом потенциале с амплитудой $V_0 \ll 1$.

2. Развитая модель Гука (РМГ-модель) — цепочка Гука в периодическом потенциале с произвольными формой, амплитудой и периодом. Как оказалось, в отдельных случаях необходимо разделять описание ФК- и РМГ-систем. Вклад граничных атомов и дискретности в решения этих моделей изучен недостаточно полно. В большинстве своем исследователи описывают случай $N = \infty$, полагая, что вкладом граничного атома можно пренебречь. Мы считаем, что такое предположение ошибочно, т. к. положение всех атомов одномерной системы жестко связано с положением любого из них через уравнения равновесия. Уравнения равновесия для граничных атомов не совпадают с уравнениями равновесия внутренних атомов. Представляет интерес на примерах точных решений ФК-, РМГ-моделей понять, в какой мере дискретность и граничные условия способны повлиять на результаты анализа, проведенного без их учета. Рассматриваемые модели ведут свое начало от работы Френкеля–Конторовой [1], описавшей движущуюся дислокацию. Актуальность [1] в настоящее время бесспорна [2] (сотни статей и книг по ее мотивам только за последние годы). В дальнейшем [2, 3] ФК-модель стала востребованной при описании пространственно модулированных структур и в нее введен параметр δ, характеризующий несоразмерности периодов цепочки и внешнего потенциала.

В [3] получено пороговое решение для основных фаз ФК-модели в континуальном приближении: при $|\delta| < \delta_c$, $\delta_c = \frac{4}{\pi}\sqrt{V_0}$ реализуется однородное состояние, если $|\delta| > \delta_c$, то пространственно модулированное состояние дислокационного типа. Там же приведено решение для основного состояния с параметрами несоразмерности вблизи $\delta = 0.5$, из которого следует, что в интервале $|\delta - 0.5| < \delta_c^2$ в системе выделяются две подрешетки.

РМГ-модель с параметрами несоразмерности вблизи $\delta = \frac{m}{n}$ исследовалась в [4,5]. Добавление мод в потенциал ФК-модели приводит к тому, что интервалы областей с подрешетками значительно уширяются, $\left|\delta - \frac{m}{n}\right| < \frac{\delta_c}{\sqrt{n}} \gg \delta_c^2$.

Параметр несоразмерности δ эквивалентен дополнительной силе Гука, растягивающей ее концы. Удобно рассматривать РМГ-модель [4,5] как цепочку Гука, на концы которой действует растягивающая сила, цепочка погружена в периодический потенциал. При таком рассмотрении становится очевидным, что для пространственно симметричных потенциалов центр масс цепочки в основном состоянии фиксирован. Он находится на ее середине, и дислокации образуются парами. Следствием этого является ошибочность заявления [2] о возможности основного состояния с одной дислокацией.

Полученное в [1] решение не удовлетворяет граничному уравнению равновесия, поэтому существует вопрос, насколько кардинально выводы дискретных моделей в континуальном приближении [1–3] могут отличаться от точных решений, с учетом границ и дискретности. Нахождение численно точных выражений для основных состояний ФК-, РМГ-моделей служит началом обсуждения вопроса об их динамике.

2. Основное состояние РМГ-модели

Нас интересует основное состояние одномерной упругопериодической цепочки из $N+1$-го атома с периодом $M+\delta$ в периодическом потенциале $V(x)$ с полным потенциалом

$$U=\sum_{n=0}^{n=N-1}\left[\frac{1}{2}\,(u_{n+1}-u_n)^2+V(Mn+n\delta+u_n)\right]$$
$$+V(u_N+MN+N\delta),\,V(x+1)=V(x),\quad M=0,1,\ldots,\tag{1}$$

где u_n — отклонение от исходного положения равновесия n-го атома цепочки. После замены $\varphi_n=u_n+n\delta$ получаем

$$U=\sum_{n=0}^{n=N-1}\left[\frac{1}{2}\,(\varphi_{n+1}-\varphi_n)^2+V(\varphi_n)\right]$$
$$+V(\varphi_N)-\delta(\varphi_N-\varphi_0)+\frac{\delta^2}{2}N.\tag{2}$$

Уравнения равновесия для N-го и 0-го атомов имеют вид

$$\varphi_N-\varphi_{N-1}-\delta+V'(\varphi_N)=0,$$
$$\varphi_0-\varphi_1+\delta+V'(\varphi_0)=0.\tag{3}$$

Уравнения равновесия для внутренних атомов записываются в виде

$$2\varphi_n-\varphi_{n-1}-\varphi_{n+1}+V'(\varphi_n)=0,\quad 0<n<N.\tag{4}$$

Потенциальная энергия (2) инвариантна относительно замены: δ на $-\delta$, φ_n на $-\varphi_n$. Из-за нечетной симметрии РМГ-системы в основном состоянии $U(-\delta)=U(\delta)$.

Ранее [3–6] анализ ФК-, РМГ-моделей проводился в струнном (континуальном) приближении, когда дискретная переменная n меняется на непрерывную x, сумма на интеграл и (2) принимает вид

$$U=\int_0^N\left[\frac{1}{2}\left(\frac{d\varphi}{dx}-\delta\right)^2+V(\varphi)\right]dx;$$
$$V(\varphi+1)=V(\varphi);\quad \varphi(0)=0.\tag{5}$$

В результате простого, но рискованного перехода (2–5), дискретная цепочка атомов становится непрерывной струной, что с математической точки зрения оставляет много вопросов, т. к. величине дифференциала dx соответствует 1.

Основное состояние (5) находится из уравнений

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2}=v'(\varphi);$$
$$\frac{1}{2}\left(\frac{d\varphi}{dx}\right)^2=V(\varphi)+C;\quad \frac{d\varphi}{dx}=\sqrt{2(V(\varphi)+C)};$$
$$a=\int_0^1\frac{d\varphi}{\sqrt{2\big(C+V(\varphi)\big)}},\tag{6}$$

где C — константа интегрирования, a — период дислокационной лестницы, с высотами ступеней, равными 1.

Из (6) следует, что $C\geq -V_{\min}$. Из условия минимума (5) по a имеем

$$\int_0^1\sqrt{(2V(\phi)+C)}d\phi=\delta;\ \frac{U}{N}=\frac{\delta^2}{2}-C;\ \delta>\delta_c;$$

$$\delta_c=\int_0^1\sqrt{2(V(\phi)-V_{\min})}d\phi.\tag{7}$$

Основное состояние РМГ-модели в струнном приближении имеет вид

$$\begin{cases}\text{при } |\delta|<\delta_c,\ \varphi(x)\equiv 0 \text{ — соразмерная фаза}\\ \text{при } |\delta|>\delta_c,\ \varphi(x)= \text{ лестница дислокаций (6)}\\ \qquad\qquad\qquad\text{— несоразмерная фаза.}\end{cases}\tag{8}$$

Параметром порядка является относительное удлинение $\frac{\varphi_N}{N}$, которое для цепочек с фиксированными концами и аналитическими потенциалами $V(\varphi)$ в точке $\delta=\delta_c$ имеет логарифмическую особенность [3]

$$\frac{\varphi_N}{N}\xrightarrow[\substack{\delta\to\delta_c+0\\ N\to\infty}]{}\frac{\text{const}}{|\ln(\delta-\delta_c)|}.\tag{9}$$

Как показано в [4], решения для цепочек со свободными концами в прямоугольно-периодических потенциалах РМГ-модели особенностью (9) не обладают. Представляет интерес выяснить, какой из вариантов континуального приближения ближе к численно точным дискретным решениям с аналитическими потенциалами $V(\varphi)$ и свободными концами цепочки.

Ранее [2,3] граничные условия стационарности (3) не принимались во внимание, а это означает закрепленность внешними силами 0- и N-атома цепочки и, следовательно, невозможность для параметра несоразмерности быть константой. Неопределенность δ приводит к большому сомнению в правильности решений (6–9) и их адекватности заявленной модели. Если же граничные атомы свободны, то константу C следует находить не только из минимума U, но и из граничного условия (3–6)

$$C=\frac{\big(\delta-V'(\varphi_N)\big)^2}{2}-V(\varphi_N);$$
$$\frac{U}{N}=V(\varphi_N)+V'(\varphi_N)\left(\delta-\frac{V'(\varphi_N)}{2}\right).\tag{10}$$

Таким образом, РМГ-модель в континуальном приближении обладает двумя основными фазами — соразмерной и несоразмерной, переход между которыми непрерывен.

В дискретной модели (2) с аналитическим потенциалом $V(\varphi)$ четной симметрии, точное решение для основного состояния соразмерной фазы имеет нечетную симметрию относительно центра цепочки и его несложно найти. После приведения $(3, 4)$ к виду, линейному по φ, имеем

$$\varphi_{\frac{N}{2}} \equiv 0; \quad \varphi_{\frac{N}{2}+n} = -\varphi_{\frac{N}{2}-n};$$

$$\varphi_{\frac{N}{2}+n+1} = q_n \varphi_{\frac{N}{2}+n}; \quad \varphi_N = \frac{\delta}{\left(q - 1 - \frac{1}{q_{\frac{N}{2}-1}}\right)};$$

$$q_{n+1} = q - \frac{1}{q_n}, \ q = q_1 = 2 + V''(0), \ n = 1, 2, \ \ldots, \ \frac{N}{2}. \tag{11}$$

Несоразмерная фаза РМГ-модели в континуальном приближении описывается потенциалом U_I

$$U_I = U_c + W(N, K, \delta) + K\delta_c - K\delta; \quad W(N, 1, \delta) = 0;$$

$$U_c = (N+1)V(0) + \frac{\delta^2}{2}N, \tag{12}$$

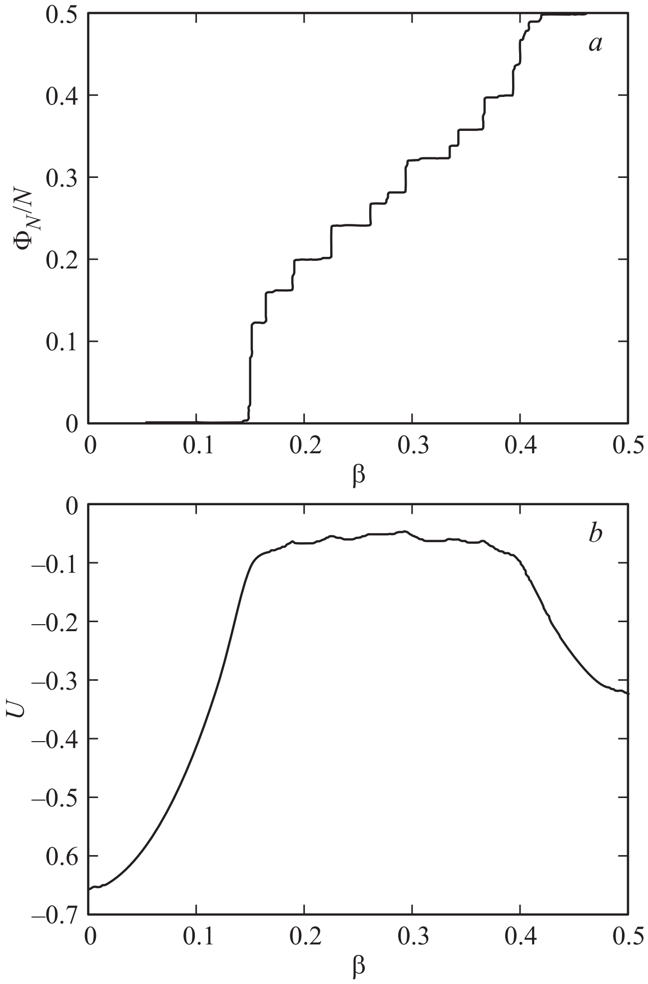
где U_I — энергия несоразмерной фазы с K-дислокациями в континуальном приближении. U_I распадается на: 1. Энергию соразмерной фазы U_c. 2. Энергию K покоящихся дислокаций $K\delta_c$. 3. $W(N, K, \delta)$ — энергии взаимодействия между дислокациями и (4), сдвиговый член из уравнения (2) $(-K\delta)$.

Из (12) следует, что переход по параметру δ, соразмерная-несоразмерная фаза, непрерывен и происходит при $\delta = \delta_c$. Дислокации отталкиваются, т.к. $W'_K = \delta - \delta_c > 0$.

Поскольку задача точного нахождения координат атомов цепочки дискретной РМГ-модели аналитически трудно решаема, то ее следует решать методами дискретной математики, т.е. численно. Предлагаем следующий алгоритм численного моделирования: через текущую координату $\Phi(N)$ граничного N-атома уравнениями стационарности (3,4) выражаются координаты остальных атомов цепочки, после чего находится минимум потенциальной энергии (2) при $\varphi_N = \Phi_N$. Начальное положение $\varphi(0)$ удобно сначала фиксировать интервалом $|\varphi(0)| \leq 0.5$, а затем проверить тождество для дробной части Φ_N, $\{\Phi_N\} \equiv -\varphi(0)$. При исследовании областей соразмерных фаз (11) шаг итераций φ_N определяется формулой $h_c = \delta q^{-N}$. Гипотеза о P-инвариантности основного состояния РМГ-модели подтверждена всеми численными экспериментами.

3. Численные эксперименты

С учетом проведенного теоретического анализа продолжены исследования, инициированные в [7]. Суть



a — зависимость относительного удлинения цепочки $\frac{\Phi_N}{N}$ от параметра несоразмерности β, $\beta \equiv \delta$. *b* — зависимость потенциальной энергии цепочки U от параметра несоразмерности β, $\beta \equiv \delta$.

опытов заключалась в последовательном „отгадывании“, с увеличением N от 1 до 30, значений $\Phi_{N=30}$, предварительно фиксировав δ в интервале $[0, 0.5]$.

Первоначально построены два графика основных состояний ФК-, РМГ-моделей с пятьюдесятью точками на каждом. Но в дальнейшем, использовав P-симметрию РМГ-модели, удалось построить на рисунке (a, b) график с 500 точками, совпадающий качественно с первоначальным.

В экспериментах использовались два типа внешних потенциалов:

1. Монохроматический потенциал ФК-модели, $V(\varphi) = -V_0 \cos 2\pi\varphi$.

2. Двухгармонический потенциал РМГ-модели, $V(\phi) = -0.64V_0(\cos 2\pi\varphi + \cos 4\pi\varphi)$. Значения V_0 выбирались из интервала $[0.01, 0.09]$, значения N — из интервала $[1, 30]$. Критические величины параметра несоразмерности (7): $\delta_{c,(1)} \approx 1.27\sqrt{V_0}$, $\delta_{c,(2)} \approx 1.51\sqrt{V_0}$. Экспериментально подтвердился результат [7]: $\frac{\Phi_N}{N}\Big|_{\delta=\delta_c} = \frac{\delta_c}{2}$,

Зависимости экспериментальных критических значений $\tilde{\delta}_c$ от амплитуды внешнего потенциала V_0 для РМГ- и ФК-моделей

(РМГ-модель) V_0	0.01	0.02	0.03	0.04	0.05	0.06	0.07	0.08	0.09
$\delta_c = 1.51\sqrt{V_0}$	0.151	0.214	0.262	0.302	0.338	0.370	0.400	0.427	0.453
$\tilde{\delta}_c$	0.149	0.204	0.241	0.264	0.283	0.300	0.316	0.332	0.347
$\tau = \frac{\delta_c - \tilde{\delta}_c}{\delta_c}$	0.013	0.047	0.080	0.112	0.163	0.189	0.21	0.222	0.234
(ФК-модель) V_0	0.01	0.02	0.03	0.04	0.05	0.06	0.07	0.08	0.09
$\delta_c = \frac{4}{\pi}\sqrt{V_0}$	0.1273	0.180	0.220	0.255	0.284	0.311	0.336	0.360	0.381
$\tilde{\delta}_c$	0.127	0.178	0.216	0.246	0.271	0.291	0.308	0.323	0.335
$\tau = \frac{\delta_c - \tilde{\delta}_c}{\delta_c}$	0.002	0.011	0.018	0.035	0.046	0.064	0.083	0.103	0.121

$V_0 \ll 1$, $N \gg 1$. Но, если в [7] по техническим причинам на графиках $\left(\frac{\Phi_N}{N}, \delta\right)$ не найдены точки начала дислокационных решений, то после использования двойной точности вычислений „double" они обнаружены.

Результаты экспериментов приведены для РМГ-модели ($V_0 = 0.01$) на рисунке; для ФК-, РМГ-моделей — в таблице.

4. Обсуждение результатов

Выяснилось, что критические точки на графиках $\left(\frac{\Phi_N}{N}, \delta\right)$, $U(\delta)$ смещаются от δ_c (7) к $\tilde{\delta}_c$ в таблице, сдвигаясь в сторону уменьшения интервала соразмерной фазы на величины следующего порядка малости по амплитуде потенциала: $\Delta\delta_c = \delta_c - \tilde{\delta}_c$, $\tau = \frac{\Delta\delta_c}{\delta_c} \sim V_0$.

Различия результатов численных экспериментов дискретных систем и их струнных приближений можно объяснить несколькими причинами:

1. Дискретностью исходной модели (2). 2. Граничными условиями (3). 3. Недостаточно корректным переходом от дискретной системы (2) к струнной модели (5). Основанием для рассмотрения третьего пункта является то, что в (5) некорректно учтена упругая энергия N-го атома, части которой нет в (2). Если же ее вычесть из (5) компенсационным членом, например $-q\frac{\phi_N^2}{2}$, то уравнение связи (7) между параметром несоразмерности δ и константой интегрирования C изменится и будет иметь вид

$$\int_0^1 \sqrt{2(V(\phi)+C)}d\phi - q\phi_N = \delta;$$

$$\frac{U}{N} = \frac{\delta^2}{2} - C - \frac{q\phi_N^2}{2N} = \frac{\delta^2}{2} - C - \frac{\delta^2}{2qN};$$

$$\delta \geq \tilde{\delta}_c; \quad \tilde{\delta}_c \approx \frac{\delta_c}{2}; \quad \left.\frac{1}{a}\right|_{\delta=\delta_c} = \frac{\delta_c}{2}. \tag{13}$$

Таким образом, компенсационный член приводит к изменению основного состояния РМГ-модели, без изменения в пределе $N \to \infty$ плотности ее энергии. Выбранный компенсационный член не позволил полностью объяснить результаты численных экспериментов, а именно, малую величину отклонения критической точки $\tilde{\delta}_c$ от δ_c. Мы предполагаем, что характер поведения параметра порядка точного решения также не претерпит больших изменений и будет соответствовать (9) (или даже скачку параметра порядка в точке $\tilde{\delta}_c$), но для подтверждения этой гипотезы следует провести более значительный объем вычислений с $N > 100$.

Основные результаты:

1. Получено доказательство применимости континуального приближения для качественного описания РМГ-модели, количественно ее потенциальная энергия в области несоразмерной фазы не совпадает с (10).

2. Доказана P-симметрия основного состояния РМГ-модели.

3. Не изменились выводы об основном состоянии и термодинамике [4–8], а также многомерной РМГ-модели [9].

4. Рациональные значения параметров несоразмерности $\delta = \frac{m}{n}$ с локальными минимумами потенциальной энергии U рис. 1 (b) соответствуют предсказаниям [4–6] и оценке их минимальной величины $n_{\max} \approx \delta_c^{-\frac{2}{3}}$.

5. Для ФК-модели ($V_0 = 0.04$) ширина локального минимума $U(\delta = 0.5)$ оказалась значительно (в 5 раз) меньше заявленного в [3]. Гипотезы о причинах отклонения теории и эксперимента в этом случае нуждаются в дополнительной экспериментальной проверке.

5. Заключение

1. Риск континуального перехода (2–5) полностью оправдался при описании соразмерных фаз ФК-, РМГ-моделей. Величины $\tau \sim V_0$ пропорциональны отклонению решений (11) от однородного состояния.

2. Несоразмерные фазы описываются континуальным приближением с точностью значительно хуже τ, формулы (6–12) мало соответствуют дискретной действительности.

3. Для непротиворечивого количественного анализа струнным пределом динамических решений ФК-, РМГ-моделей [1,2] к потенциальной энергии (5) следует добавлять компенсационную функцию $f_{\mathrm{com}}(\varphi_N)$

$$f_{\mathrm{com}}(\varphi_N) = \delta\tau\,\varphi_N - q\,\frac{\varphi_N^2}{2} + \ldots \tag{14}$$

4. Энергия (14), компенсирующая дискретность и граничные условия, указывает на то, что описание континуальным приближением требует введения поверхностной силы, которая способна кардинально изменить многие результаты [1,2].

Мы считаем более правильным, по аналогии с разобранными выше основными состояниями, изучать возбужденные состояния систем [2] на дискретных моделях с конечным числом частиц с полным учетом граничных условий.

В заключение выражаем глубокую благодарность Е.М. Артемьеву, О.П. Сушкову и участникам семинара А.В. Чаплика за полезное обсуждение работы.

Список литературы

[1] Я.И. Френкель, Т. Конторова. ЖЭТФ **8**, 1340, (1938).
[2] O.M. Braun, Y.S. Kivshar. The Frenkel-Kontorova Model. Springer, Berlin (2004). 536 c.
[3] В.Л. Покровский, А.Л. Талапов. ЖЭТФ **75**, 1156 (1978).
[4] А.Н. Филонов. Электронный журнал „Исследовано в России“ **22**, 261 (2008). http://zhurnal.ape.relarn.ru/articles/2008/022.pdf.
[5] А.Н. Филонов, Б.С. Добронец, Л.И. Квеглис. Электронный журнал „Исследовано в России“ **44**, 511 (2008). http://zhurnal.ape.relarn.ru/articles/2008/044.pdf.
[6] А. Филонов. Точно решаемые модели с приложениями. LAP LAMBERT Academic Publishing, Moscow (2012). 103 c.
[7] Б.С. Добронец, А.Н. Филонов. Журнал СФУ. Математика и Физика, **6**, *3*, 279–282 (2013). (Boris S. Dobronets, Alexsandr N. Filonov. J. Siberian Federal University Mathematics & Physics 2013, **6**, *3*, 279–282).
[8] A.N. Filonov, G.M. Zaslavsky. Phys. Lett., **85** A, 237, (1981).
[9] А.Н. Филонов. Письма в ЖЭТФ **57**, *9*, 561 (1993).