УДК 541.64:539.3

СОЛИТОНЫ В ДЕФОРМИРОВАННОЙ АТОМНОЙ ЦЕПОЧКЕ

Е.С.Савин

Рассматривается распространение длинноволновых акустических солитонов и солитонов огибающей локализованных колебаний в однородно-деформированной ангармонической цепочке. Исследовано влияние на параметры солитонов внешней силы. Показано, что свойства солитонных решений зависят от параметров межатомного взаимодействия и величины приложенной силы.

1. Выяснению роли и значения ангармонических эффектов в термофлуктуационном разрушении твердых тел посвящено достаточно большое число работ (см., например, [1]). При этом в уравнениях динамики кристаллической решетки учитывали нелинейные члены, используя самые различные варианты теории возмущений. Значительно меньше изучено влияние на разрушение существенно нелинейных образований — солитонов (и кноидальных волн), являющихся точными решениями нелинейных уравнений движения. Аналитические расчеты и эксперименты по машинному моделированию, проведенные в [2–5] для линейной цепочки атомов — одномерной модели твердого тела, не прояснили до конца картины участия солитонов в разрушении. Представляется, что наиболее существенной роль солитонов может быть в различного рода энергетических процессах переноса, происходящих в деформированных телах, а также в образовании микроскопических дефектов, проявляющихся в процессе хрупкого разрушения. В связи с этим представляет интерес изучение влияния внешнего воздействия на параметры солитонов. В настоящей работе рассматривается распространение длинноволновых акустических солитонов и солитонов огибающей локализованных колебаний в деформированной постоянными внешними силами атомной цепочке.

2. Рассмотрим линейную цепочку из N одинаковых атомов массы m, потенциальная энергия которой при учете взаимодействия только между ближайшими соседями имеет вид

$$U = \sum_{n=1}^{N} \left[\Phi\left(R_n - R_{n-1}\right) - F\left(R_n - R_{n-1}\right)\right]. \tag{1}$$

Здесь $\Phi(R)$ — потенциал взимодействия соседних атомов; R_n — координата n-го атома; F — внешняя сила, деформирующая цепочку.

В статической решетке, находящейся в исходном положении в однородном состоянии (все межатомные расстояния равны), при растяжении ее внешней силой возможны два равновесных состояния — однородное и неоднородное (расстояние между какой-либо парой атомов больше, чем у остальных). В последнем случае это соответствует образованию в цепочке некоторого дефекта, вносящего особенности в распространение солитонов. Далее мы рассматриваем только такие случаи, когда под действием внешней силы все связи деформированы одинаково. Разлагая потенциальную функцию (1) в ряд Тейлора около равновесного положения атомов a, определяемого условием $\partial\Phi/\partial R = F$, получим

$$U=\sum_{n=1}^{N}\left[\Phi(a)-Fa+\frac{1}{2}k_2\left(u_n-u_{n-1}\right)^2+\frac{1}{6}k_3\left(u_n-u_{n-1}\right)^3+\frac{1}{24}k_4\left(u_n-u_{n-1}\right)^4\right], \tag{2}$$

где u_n — смещение n-го атома из положения равновесия; $k_2 = \Phi''(a)$, $k_3 = \Phi'''(a)$, $k_4 = \Phi^{IV}(a)$ — силовые постоянные.

Используя в качестве межатомного потенциала функцию Морзе, получим явную зависимость величин a, $k_i\,(i = 2,3,4)$ от внешней силы

$$a = r_0 - \frac{1}{\alpha}\ln\frac{1}{2}\left(1+\sqrt{1-F_*}\right),$$

$$k_2 = \alpha^2 D\sqrt{1-F_*}\left(1+\sqrt{1-F_*}\right),$$

$$k_3 = -\alpha^3 D\left(1+\sqrt{1-F_*}\right)\left(1+2\sqrt{1-F_*}\right),$$

$$k_4 = \alpha^4 D\left(1+\sqrt{1-F_*}\right)\left(3+4\sqrt{1-F_*}\right), \tag{3}$$

где D — глубина потенциальной ямы, r_0 — равновесное расстояние между атомами при $F = 0$, $1/\alpha$ характеризует ширину ямы, $F_* = F/F_m$ ($F_m = \alpha D/2$ — прочность межатомной связи) — приведенная сила.

Уравнение движения атомов цепочки с потенциальной энергией в форме (2) имеет вид

$$m\ddot{u}_n = k_2\left(u_{n+1}-2u_n+u_{n-1}\right)+\frac{1}{2}k_3\left[\left(u_{n+1}-u_n\right)^2-\left(u_n-u_{n-1}\right)^2\right]+$$

$$+\frac{1}{6}k_4\left[\left(u_{n+1}-u_n\right)^3-\left(u_n-u_{n-1}\right)^3\right], \tag{4}$$

и с математической точки зрения рассматриваемая задача свелась к изучению распространения нелинейных волн в свободной решетке [6], параметры которой, однако, зависят от внешней силы.

3. В длинноволновом приближении уравнения (4) принимают вид

$$u_{tt} = v^2\left(u_{xx}+\frac{1}{12}a^2u_{xxxx}+\frac{k_3a}{k_2}u_xu_{xx}+\frac{k_4a^2}{2k_2}u_x^2u_{xx}\right), \tag{5}$$

где $v^2 = k_2 a^2/m$ — скорость звука в деформированной цепочке. В силу различной зависимости k_2 и a от F величина скорости может как уменьшаться, так и увеличиваться с ростом силы. Действительно, при малом напряжении ($F_* \ll 1$)

$$v^2 = v_0^2 \left[1 - F_* \left(3/4 - 1/2\alpha r_0\right)\right],$$

где $v_0^2 = 2\left(\alpha r_0\right)^2 D/m$ — скорость звука в недеформированной цепочке и характер зависимости $v(F)$ определяется величиной αr_0. Локализованными решениями уравнения (5) являются солитоны (в терминах деформации $Z = u_x$ или кинки на языке смещений u), распространяющиеся со скоростями $V > v$.

С учетом результатов работы [6] при нулевых граничных условиях ($Z \to 0$ и $Z_x \to 0$, когда $|x| \to \infty$) выражения для солитонов растяжения и сжатия имеют вид

$$Z_r = 2C \left\{ M \operatorname{ch}^2 \left[\frac{1}{2}\sqrt{C}(x - x_0)\right] + N \operatorname{sh}^2 \left[\frac{1}{2}\sqrt{C}(x - x_0)\right] \right\}^{-1}, \quad 0 < Z_r < Z_2, \tag{6}$$

$$Z_c = -2C \left\{ N \operatorname{ch}^2 \left[\frac{1}{2}\sqrt{C}(x - x_0)\right] + M \operatorname{sh}^2 \left[\frac{1}{2}\sqrt{C}(x - x_0)\right] \right\}^{-1}, \quad Z_1 < Z_c < 0. \tag{7}$$

В выражениях (6), (7) $x = x - Vt$, x_0 — постоянная интегрирования,

$$M = \sqrt{B^2 + 4AC} + B, \quad N = \sqrt{B^2 + 4AC} - B,$$

$$Z_1 = -M/2A, \quad Z_2 = -N/2A,$$

$$A = \frac{k_4}{k_2}, \quad B = \frac{4k_3}{ak_2}, \quad C = \frac{12}{a^2}\left(\frac{V^2}{v^2} - 1\right). \tag{8}$$

Выражения (3), (6)–(8) определяют свойства континуальных акустических солитонов в деформированной решетке. Рассмотрим сначала случай, когда в разложении потенциальной энергии (2) присутствует только кубический ангармонизм. Тогда $k_4 = 0$, $A = 0$, $M = (|B| + B)/2$, $N = (|B| - B)/2$. Поскольку $B < 0$, то $M = 0$ и $N = |B|$. Выражения для солитона сжатия (солитона растяжения в решетке с $k_4 = 0$ не существует) и кинка будут иметь вид

$$Z_c = -(C/|B|) \operatorname{ch}^{-2} \left[\frac{1}{2}\sqrt{C}(x - x_0)\right], \quad u = \left(2\sqrt{C}/|B|\right)\left[1 - \operatorname{th} \frac{1}{2}\sqrt{C}(x - x_0)\right].$$

Если независимым параметром задачи является величина ступенчатого возмущения $u_0 \equiv u(-\infty) = 4\sqrt{C}/|B|$, то при малом внешнем натяжении ($F_* \ll 1$) выражения для амплитуды ($|Z_c^0| = C/|B|$) и ширины солитона ($\Delta x = 2/\sqrt{C}$) имеют вид

$$|Z_c^0| = \frac{3\alpha u_0^2}{4r_0}\left[1 + F_*\left(\frac{1}{6} - \frac{1}{4\alpha r_0}\right)\right],$$

$$\Delta x = \frac{2r_0}{3\alpha u_0}\left[1 - F_*\left(\frac{1}{6} - \frac{1}{4\alpha r_0}\right)\right]. \qquad (9)$$

Из (9) следует, что существуют решетки с такими значениями параметров межатомного потенциала (в данном случае $\alpha R_0 = 1.5$), что внешняя сила не влияет (в области малых значений F) на характеристики солитонов (длинноволновых) — амплитуду и ширину. При $\alpha r_0 < 1.5$ амплитуда солитона уменьшается, а при $\alpha r_0 > 1.5$ увеличивается с ростом силы. Для ширины солитона ситуация противоположная.

Принятое длинноволновое приближение применимо при выполнении условия $\Delta x > a$, т.е. $u_0 < 4(1 - F_*/6)/3\alpha$. Таким образом, допустимые значения амплитуды ступенчатого возмущения u_0, а следовательно, скорости распространения солитона

$$V^2 = v_0^2\left[1 - F_*\left(\frac{3}{4} - \frac{1}{2\alpha r_0}\right)\right]\left[1 + \frac{3\alpha^2 u_0^2}{4}\left(1 + \frac{F_*}{3}\right)\right]$$

определяются внешней силой. Характер зависимости $V(F)$ определяется величиной параметра αr_0.

При большом внешнем натяжении ($F_* \to 1$) выражения для параметров солитона сжатия имеют вид

$$|Z_c^0| = \frac{\alpha u_0^2}{4}\left[\left(r_0 + \frac{1}{\alpha}\ln 2\right)\sqrt{1 - F_*}\right]^{-1},$$

$$\Delta x = \frac{2}{\alpha u_0}\left(r_0 + \frac{1}{\alpha}\ln 2\right)\sqrt{1 - F_*},$$

$$V^2 = \frac{1}{2}v_0^2\sqrt{1 - F_*}\left(1 + \frac{1}{\alpha r_0}\ln 2\right)^2\left[1 + \frac{\alpha^2 u_0^2}{12(1 - F_*)}\right].$$

В данном случае величины Δx, V уменьшаются, а величина Z_c^0 увеличивается с ростом силы. При условии $1 \geqslant F_* \gg 1 - \alpha^2 u_0^2/12$ скорость солитона

$$V^2 = \frac{v_0^2\alpha^2 u_0^2}{24}\left(1 + \frac{1}{\alpha r_0}\ln 2\right)^2 (1 - F_*)^{-1/2}$$

увеличивается с ростом силы.

Рассмотрим теперь распространение солитонов в решетке с $k_4 \neq 0$. Хотя в этом случае в цепочке могут существовать одновременно солитоны сжатия и растяжения, качественного изменения в действии силы на их параметры не происходит. Согласно (6) и (7), амплитуды солитонов будут равны

$$|Z_{r,c}^0| = \frac{6\left(V^2/v^2 - 1\right)}{a|k_3|}\left[\sqrt{1 + \frac{3k_2k_4}{k_3^2}\left(\frac{V^2}{v^2} - 1\right)} \mp 1\right]^{-1}. \qquad (10)$$

Независимым параметром здесь является скорость солитона V, а верхний знак в (10) относится к солитону растяжения. Если $V \gg v$, то при малом натяжении ($F_* \ll 1$)

$$\left|Z^0_{r,c}\right| = \frac{6V}{\sqrt{21}\alpha r_0 v_0}\left[1 + F_*\left(\frac{15}{56} - \frac{1}{2\alpha r_0}\right)\right].$$

При $\alpha r_0 > 28/15$ амплитуда солитонов увеличивается, а при $\alpha r_0 < 28/15$ уменьшается с ростом силы. При $\alpha r_0 = 28/15$ действие силы не сказывается на свойствах солитонов.

При $V \gg v$ и больших значениях силы ($F_* \to 1$)

$$\left|Z^0_{r,c}\right| = \frac{\sqrt{8}V}{\alpha r_0 v_0}\left(1 - \frac{2}{3}\sqrt{1 - F_*}\right)$$

и для всех значений αr_0 амплитуда солитонов увеличивается с ростом F_*.

4. Рассмотрим уравнения динамики решетки при больших волновых числах. Для этого вернемся к дискретным уравнениям (4) и, имея в виду, что в гармоническом приближении при $\omega \to \omega_m$ ($\omega_m^2 = 4k_2/m$ — максимальная частота колебаний атомов) соседние атомы колеблются почти в противофазе, введем новые переменные [7]

$$\varphi_n = u_{2n} - u_{2n+1}, \quad \psi_n = u_{2n} + u_{2u+1},$$

где φ_n представляет собой разность смещений двух соседних атомов, а ψ_n определяет удвоенное смещение центра тяжести двух соседних атомов. Функции φ_n и ψ_n могут рассматриваться как медленно меняющиеся функции координаты $x = na$. Система уравнений для нахождения новых переменных принимает вид

$$m\varphi_{tt} + 2k_2a^2\varphi_{xx} + 4k_2\varphi + 2k_3a\varphi\psi_x + \frac{2}{3}k_4\varphi^3 = 0, \tag{11}$$

$$m\psi_{tt} - 2k_2a^2\psi_{xx} - 2k_2a\varphi_x = 0. \tag{12}$$

Уравнение (12) своим третьим членом в левой части отличается от соответствующего уравнения в работе [7], что не позволяет воспользоваться приведенным там решением, но дает возможность применить к системе уравнений (11), (12) метод решений, разработанный в [7].

В ангармонической решетке возможны собственные локальные или резонансные колебания [7,8]. В нашем случае существуют локализованные колебания с $\omega > \omega_m$ и в области ненулевой амплитуды происходит разбиение цепочки на пары колеблющихся с частотой ω атомов, центры тяжести которых практически покоятся. Из уравнения (12), полагая $\psi_{tt} = 0$, находим $\psi_x = -\varphi/a$. Подставляя это выражение в (11), получим

$$m\varphi_{tt} + 2k_2a^2\varphi_{xx} + 4k_2\varphi - 2k_3\varphi^2 + \frac{2}{3}k_4\varphi^3 = 0. \tag{13}$$

Локализованное в пространстве и периодическое во времени решение уравнения (13), согласно [7], ищем в виде

$$\varphi(x,t) = C(x) + A(x)\cos\omega t + B(x)\cos 2\omega t, \tag{14}$$

где C, A и B — исчезающие на бесконечности функции координаты. Подставляя (14) в (13) и собирая члены при различных гармониках, получим с учетом условия $A \gg C, B$ следующую систему уравнений для определения гармоник:

$$A_{xx} - \frac{2}{a^2}\left(\frac{\omega^2}{\omega_m^2} - 1\right)A + \frac{k_4}{4k_2a^2}A^3 = 0, \tag{15}$$

$$B_{xx} - \frac{2}{a^2}\left(\frac{4\omega^2}{\omega_m^2} - 1\right)B - \frac{k_3}{2k_2a^2}A^2 = 0,$$

$$C_{xx} + \frac{2}{a^2}C - \frac{k_3}{2k_2a^2}A^2 = 0. \tag{16}$$

Решением уравнения (15), удовлетворяющим условиям на бесконечности, является функция

$$A(x) = 4\left(\frac{k_2}{k_4}\right)^{1/2}\frac{\varepsilon}{\operatorname{ch}\left(\sqrt{2}\varepsilon x/a\right)}, \quad \varepsilon^2 = \frac{\omega^2}{\omega_m^2} - 1.$$

Так как уравнение (4) получено в приближении $k_4u^3 \ll k_2u$, то в уравнении (13) должно выполняться условие $k_4\varphi^3 \ll k_2\varphi$, из которого следует, что $\omega^2/\omega_m^2 - 1 \ll 1$, т.е. величина $\varepsilon \ll 1$ является малым параметром и определяет величину отщепления частоты локализованного колебания ω от верхнего края сплошного спектра частот ω_m в гармоническом приближении. Необходимые частные решения неоднородных уравнений (16), удовлетворяющие граничным условиям, легко найти, если учесть, что $B_{xx}/B \sim C_{xx}/C \sim A_{xx}/A \sim \varepsilon^2$, и производную в левой части уравнений (16) можно опустить. В результате для величин φ и ψ с точностью до ε^2 получаем выражения

$$\varphi(x,t) = 4\left(\frac{k_2}{k_4}\right)^{1/2}\frac{\varepsilon\cos\omega t}{\operatorname{ch}\left(\sqrt{2}\varepsilon x/a\right)} + 4\frac{k_3}{k_4}\left(1 - \frac{\cos 2\omega t}{3+4\varepsilon^2}\right)\frac{\varepsilon^2}{\operatorname{ch}^2\left(\sqrt{2}\varepsilon x/a\right)}, \tag{17}$$

$$\psi(x) = -2\sqrt{2}\left(\frac{k_2}{k_4}\right)^{1/2}\operatorname{arctg}\left(\operatorname{sh}\left(\sqrt{2}\varepsilon x/a\right)\right) - 4\sqrt{2}\frac{\varepsilon k_3}{k_4}\left(\frac{1+2\varepsilon^2}{3+4\varepsilon^2}\right)\operatorname{th}\left(\sqrt{2}\varepsilon x/a\right). \tag{18}$$

Из (17) следует, что амплитуда колебаний имеет порядок величины $\varepsilon \ll 1$, а пространственная область локализации этих колебаний порядка $\Delta x \sim a/\varepsilon \gg 1$. Отметим, что решение (17) локализовано вблизи $x = 0$, но оно может быть локализовано вблизи любой точки $x = x_0$, учет последующих членов разложения в (14) не расширяет область локализации [7]. Кроме того, в [9] показано, что собственные локальные колебания (17) генеалогически связаны с солитонами огибающей. В основном по параметру ε приближении получаем

$$\varphi = 4\left(\frac{k_2}{k_4}\right)^{1/2} \frac{\varepsilon \cos\omega t}{\operatorname{ch}\left(\sqrt{2}\varepsilon x/a\right)},$$

$$\psi = -2\sqrt{2}\left(\frac{k_2}{k_4}\right)^{1/2} \operatorname{arctg}\left(\operatorname{sh}\left(\sqrt{2}\varepsilon x/a\right)\right),$$

и в случае малого натяжения ($F_* \ll 1$) амплитуда огибающей $\varphi_0 = 4\varepsilon(1 - 3F_*/38)/\sqrt{7}\alpha$ уменьшается с ростом F_*. Аналогичная зависимость получается и при большом значении силы ($F_* \to 1$). Ширина солитона $\Delta x \sim r_0(1 + F_*/4\alpha r_0)/\varepsilon$ с ростом F_* увеличивается.

5. Полученные результаты свидетельствуют о том, что проявление действия внешней силы на солитоны может быть самым разнообразным. Во-первых, это зависит от вида солитонов (длинноволновые акустические, солитоны огибающих, не рассматриваемые здесь жестколокализованные солитоны) . Во-вторых, свойства солитонов существенно определяются параметрами межатомного потенциала и в значительной степени зависят от величины силы. Внешняя сила может как усиливать проявления нелинейных эффектов (увеличение амплитуды солитонов), так и делать их менее выраженными (уменьшение амплитуды). Особый интерес для изучения роли существенно нелинейных образований в разрушении твердых тел должны представлять солитоны огибающей из-за их особенности [9] — неустойчивости однородного возбуждения решетки относительно распада на собственные локальные колебания, в которых энергия колебаний атомов на порядок превышает среднюю. Солитоны огибающей локализованных колебаний могут генерироваться термически подобно вакансиям, но с меньшей энергией активации [8]. Они могут появляться и при низких температурах, если твердое тело становится сильно ангармоническим в результате воздействия на него внешних сил.

Список литературы

[1] Сб. «Нелинейные эффекты в кинетике разрушения». Л., ФТИ АН СССР, 1988. 181 с.
[2] Мелькер А.И. // ФТТ. 1982. Т. 24. № 10. С. 3186–3188.
[3] Лагунов В.А. // ФТТ. 1986. Т. 28. № 11. С. 3466–3472.
[4] Смирнов В.В., Маневич Л.И., Ениколопян Н.С. // ДАН СССР. 1989. Т. 306. № 6. С. 1377–1380.
[5] Сабиров Р.Х. // ФТТ. 1990. Т. 32. № 7. С. 1992–1995.
[6] Wadati M. // J. Phys. Soc. Jap. 1975. V. 38. N 3. P. 673–680.
[7] Косевич А.М., Ковалев А.С. // ЖЭТФ. 1974. Т. 67. № 5. С. 1793–1804.
[8] Sievers A.J., Takeno S. // Phys. Rev. Lett. 1988. V. 61. N 8. P. 970–973.
[9] Бурлаков В.М., Киселев С.А., Рукасов В.И. // Письма в ЖЭТФ. 1990. Т. 51. № 9. С. 481–484.

Московский педагогический
государственный университет

Поступило в Редакцию
19 июля 1993 г.