НЕЛИНЕЙНЫЕ ВОЛНЫ НОВОГО ТИПА НА ИНТЕРФЕЙСЕ ПРИ ФЕРМИ-РЕЗОНАНСЕ КОЛЕБАНИЙ ГРАНИЧАЩИХ КРИСТАЛЛОВ

© *О.А.Дубовский, А.В.Орлов*

Физико-энергетический институт,
249020 Обнинск, Калужская обл., Россия
(Поступила в Редакцию 13 июля 1995 г.
В окончательной редакции 8 ноября 1995 г.)

Исследуются нелинейные экситонные колебательные возбуждения, распространяющиеся вдоль интерфейса в условиях Ферми-резонанса граничащих кристаллов. Предложен метод решения соответствующей системы нелинейных динамических уравнений, использующий оригинальную рекуррентную процедуру. С использованием этого метода найдены решения солитонного типа. Показано, что обнаруженное в предыдущих работах решение этого типа существует не только при фиксированной частоте, найденной ранее при условии жесткого ограничения на связь огибающих нелинейных волн в граничащих кристаллах, но и в более широком диапазоне частот. Найдено несколько принципиально новых решений квазисолитонного типа для нелинейных волн, распространяющихся вдоль интерфейса.

Известно, что эпитаксиальное выращивание неорганических кристаллических материалов возможно только для веществ с малой постоянной решетки. В то же время в связи с тем, что в органических материалах атомы связаны слабыми ван-дер-ваальсовыми силами, возможно создание сверхрешеток с большими постоянными кристаллических структур. В последнее время интенсивно развиваются новые технологии получения кристаллических органических твердых пленок и многослойных сверхрешеток с дальним порядком для нелинейных оптических устройств, разрабатываемых, в частности, с целью создания оптического компьютера [1–3]. В связи с этим необходим теоретический анализ линейных и нелинейных оптических свойств многослойных органических материалов. Некоторые связанные с этим проблемы обсуждались недавно в работах [4–9]. В [5] было указано на один из механизмов оптической нелинейности многослойных органических структур. Он основан на связанном с ферми-резонансом взаимодействии экситонных возбуждений контактирующих слоев. В [6,7,9] обсуждался ферми-резонанс двух компонент интерфейса (границы раздела двух соседних кристаллов) в многослойных структурах для случая, когда энергия экситона $\hbar\omega_c$ типа C в одном C-слое близка к суммарной энергии двух экситонов B типа $2\hbar\omega_b$ в соседнем слое. В этих работах были найдены новые состояния: квантовые и классические интерфейсные моды в условиях ферми-резонанса (FRIM), возникающие благодаря ангармоническому взаимодействию между молекулами B- и C-типа.

В [7] было показано, что рассматриваемое ангармоническое взаимодействие может приводить к бистабильности при переносе энергии. Для случая простейшей одномерной модели было продемонстрировано, что существует тесная связь между бистабильностью и классическими FRIM. Этот подход был распространен в [8,9] на трехмерные системы с единственным интерфейсом между двумя органическими материалами. Было найдено дисперсионное соотношение для нелинейных волн, распространяющихся вдоль интерфейса. В [8,9] было показано, что в длинноволновом пределе только при весьма жестком ограничении на параметры системы, определяющие перенос энергии вдоль интерфейса, существуют солитонные возбуждения с единственной фиксированной частотой, определяемой этими параметрами.

В настоящей работе показано, что это ограничение связано с тем, что в аналитическом расчете [8,9] использовался лишь определенный вид нелинейных волн типа обратного гиперболического косинуса. Как это следует из приведенных ниже расчетов, огибающие могут иметь более сложную, чем обратный гиперболический косинус, пространственно-временную зависимость. Полученная в [8,9] частота солитона при жесткой связи между параметрами ω_b, ω_c, ширинами B- и C-зон является лишь одной точкой на более общей зависимости от несущей частоты Ω, от тех же параметров, которые при этом не связаны каким-либо жестким условием. В данной работе предлагается оригинальный рекуррентный метод решения системы нелинейных уравнений, описывающих в классическом приближении распространение нелинейных волн вдоль интерфейса. С помощью этого метода с использованием ЭВМ найдено несколько типов решений соответствующей системы уравнений. Только одно из найденных решений соответствует солитонному возбуждению, найденному в [8,9] в длинноволновом пределе. Некоторые другие решения имеют принципиально иной тип огибающих. В частности, найдены пульсирующие, а не монотонные огибающие, огибающие типа «темнового» солитона и т. д. Детальный анализ найденных решений предполагается в дальнейшем. Предложенный метод также позволяет непосредственно проследить образование возбуждений типа бисолитона, трисолитона и т. д. Возможно, предложенный метод может быть использован и для исследования нелинейных решений при ангармонизме иного типа, отличного от ангармонизма, определяющего ферми-резонанс.

Рассмотрим одномерную модель интерфейса (рис. 1,*a*) в виде системы пар молекул B и C, связанных в замкнутую кристаллическую цепочку (рис. 1,*b*). Ограничение замкнутой цепочкой не является принципиальным для предложенного далее метода и используется лишь для сокращения численных расчетов. Учет взаимодействия граничных молекул и молекул в «глубине» B- и C-кристаллов не вызывает принципиальных проблем. При учете кубического ангармонизма гамильтониан H такой кристаллической цепочки определяется следующим образом [6]:

$$H = H_c + H_b + H_{\text{int}}, \tag{1}$$

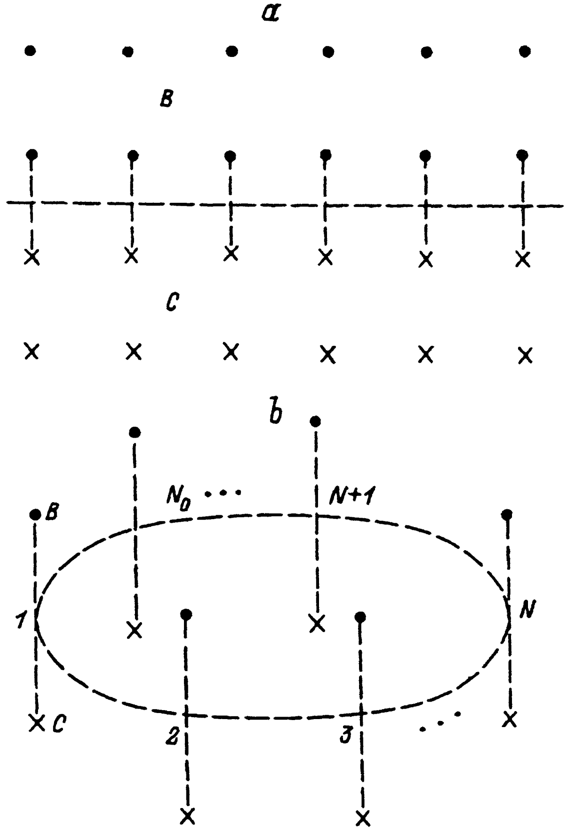

Рис. 1. Представление кристаллического интерфейса (a) в виде замкнутой кристаллической цепочки (b).

где H_c и H_b имеют вид

$$H_c = \sum_n \hbar\omega_c c_n^+ c_n + \sum_{nm} V_{nm}^{(c)} c_n^+ c_m, \tag{2}$$

$$H_b = \sum_n \hbar\omega_b b_n^+ b_n + \sum_{nm} V_{nm}^{(b)} b_n^+ b_m + A \sum_n b_n^+ b_n^+ b_n b_n. \tag{3}$$

В (1)–(3) b^+, c^+, b, c — бозе-операторы рождения и уничтожения возбуждений, $V_{nm}^{(c)}$ и $V_{nm}^{(b)}$ — матричные элементы оператора межмолекулярного взаимодействия, A — константа ангармонического взаимодействия четвертого порядка. Гамильтониан взаимодействия H_{int} между молекулами B и C определяется кубическим ангармонизмом, определяющим эффект ферми-резонанса.

$$H_{\text{int}} = \Gamma\left[c_n (b_n^+)^2 + b_n^2 c_n^+\right], \tag{4}$$

где Γ — константа взаимодействия. Детальное обоснование такого вида гамильтонина приводится в [6].

Уравнения движения для операторов b_n, c_n

$$i\hbar\frac{db_n}{dt} = -[H, b_n], \quad i\hbar\frac{dc_n}{dt} = -[H, c_n] \tag{5}$$

имеют с учетом (1)–(4) при взаимодействии ближайших соседей $V_{nm}^{(c,b)} = V_{c,b}\delta_{n,m\pm 1}$ следующий вид:

$$i\hbar\frac{db_n}{dt} = \hbar\omega_b b_n + V_b(b_{n+1} + b_{n-1}) + 2\Gamma b_n^+ c_n,$$

$$i\hbar\frac{dc_n}{dt} = \hbar\omega_c c_n + V_c(c_{n+1} + c_{n-1}) + \Gamma b_n b_n. \tag{6}$$

Решение уравнения Шредингера

$$H|2\rangle = E|2\rangle \tag{7}$$

для волновой функции смешанного состояния C, 2B с энергией E может быть найдено в виде [6]

$$|2\rangle = \sum_n \Phi_n c_n^+|0\rangle + \sum_{nm} \Psi_{nm} b_n^+ b_m^+|0\rangle, \tag{8}$$

где $|0\rangle$ — основное состояние. Подстановка (8) в (7) приводит после некоторых вычислений к следующей системе уравнений для функций Φ_n и Ψ_{nm}:

$$E\Phi_n = \hbar\omega_c\Phi_n + \sum_m V_{nm}^{(c)}\Phi_m + \Gamma\Psi_{nn},$$

$$E\Psi_{nm} = 2\hbar\omega_b\Psi_{nm} + \sum_l \left(V_{nl}^{(b)}\Psi_{lm} + V_{ml}^{(b)}\Psi_{nl}\right) + 2\Gamma\Phi_n\Psi_{nm} + 2A\Psi_{nm}\delta_{nm}. \tag{9}$$

При больших числах заполнения уровней возбуждений, т. е. при сильной накачке, обычно используется классическое приближение, предложенное для исследования ферми-резонанса в [5–7]. Мы не будем приводить полностью процедуру решения (9) и согласование получаемых решений с полученными далее классическими решениями. Процедура такого согласования представлена в [9]. Как и в [9], для нахождения соответствующих классических решений будем полагать, что константа ангармонизма A достаточно велика $A \gg |V_b|$. При этом в соответствии с [8] в классическом приближении все операторы в (6) заменяются их средними значениями $\langle b_n\rangle = B_n$ и $\langle c_n\rangle = C_n$, где B_n и C_n — классические амплитуды колебаний. Эти переменные удовлетворяют следующей системе уравнений:

$$i\hbar\frac{\partial B_n}{\partial t} - \hbar\omega_b B_n - V_b(B_{n+1} + B_{n-1}) = 2\Gamma B_n^* C_n, \tag{10a}$$

$$i\hbar\frac{\partial C_n}{\partial t} - \hbar\omega_c C_n - V_c(C_{n+1} + C_{n-1}) = \Gamma B_n^2. \tag{10b}$$

В [8], как это видно из последующего анализа, найдено лишь одно из частных решений этой системы, соответствующее солитону, распространяющемуся вдоль поверхности интерфейса между двумя кристаллами, причем, что существенно, полученные в континуальном приближении $B_n(t) \to B(z,t)$ и $C_n(t) \to C(z,t)$ «пропорциональны» (z — координата вдоль интерфейса)

$$B(z,t) = \frac{\alpha \exp\Bigl(-i\Omega t/2 - ivz/2V_b(a^2/\hbar)\Bigr)}{\mathrm{ch}^2[\varkappa(z-vt)]},$$

$$C(z,t) = \frac{\alpha\beta \exp\Bigl(-i\Omega t - ivz/V_b(a^2\hbar)\Bigr)}{\mathrm{ch}^2[\varkappa(z-vt)]}, \tag{11}$$

где

$$\alpha = \frac{\hbar}{2\Gamma}(\tilde\omega_c - 2\tilde\omega_b), \quad \varkappa = a^{-1}\left[\frac{\hbar(\tilde\omega_c - 2\tilde\omega_b)}{6V_b}\right]^{1/2},$$

$$\Omega = \frac{2}{3}(2\tilde\omega_c - \tilde\omega_b) - \frac{V_b}{2\hbar}(ka)^2,$$

$$V_b = 2V_c, \quad v = -(V_b/\hbar)ka^2, \quad \beta = \pm 1,$$

где a — постоянная решетки.

При этом для «стоячего» солитона с волновым вектором $\mathbf{k}$ вдоль интерфейса, равным нулю, решение имеет вид

$$B(z,t) = \frac{\alpha\exp(-i\Omega t/2)}{\mathrm{ch}^2\,\varkappa z}, \quad C(z,t) = \beta B(z,t)\exp(-i\Omega t/2), \tag{12}$$

где

$$\alpha \equiv \frac{3\sqrt{V_bV_c}}{2\sqrt{2}\Gamma}\frac{\hbar(2\tilde\omega_b - \tilde\omega_c)}{V_c - 2V_b}, \quad \varkappa = \frac{1}{2a}\sqrt{\frac{(2\tilde\omega_b - \tilde\omega_c)\hbar}{V_c - 2V_b}},$$

$$\tilde\omega_{b,c} = \omega_{b,c} + 2v_{b,c}, \quad v_{b,c} = \frac{V_{b,c}}{\hbar}, \quad \beta = \pm\sqrt{\frac{V_b}{2V_c}}.$$

При этом несущая частота Ω солитона жестко фиксирована следующим соотношением:

$$\Omega = \Omega_0 = 2\left[\tilde\omega_c\frac{V_b}{V_c} - \tilde\omega_b\right] / \left[2(V_b/V_c) - 1\right]. \tag{13}$$

Для движущегося солитона ($\mathbf{k} \neq 0$) аналогичным образом величины $B(z)$ и $C(z)$ пропорциональны, фиксирована несущая частота и, более того, должно существовать жесткое соотношение $V_b = 2V_c$ [8]. Наши результаты показывают, что указанные ограничения для «стоячего» солитона обусловлены только a priori принятой пропорциональностью пространственно-временной зависимости $B(z,t)$ и $C(z,t)$. Такая пропорциональность, как показывают наши расчеты, существует только в «выколотых» точках Ω_0, найденных в [8].

В дальнейшем мы будем рассматривать только симметричные относительно условно определенного узла 1 решения на системе узлов $1, 2, 3, \ldots, N$ «половины» цепочки ($b_n \equiv b_{N_0-n+2}$, $c_n \equiv c_{N_0-n+2}$), $N \equiv (N_0+2)/2$, N_0 — четное. Проведем масштабное преобразование $\tilde{b}_n \equiv (\Gamma/\hbar)B_n$, $\tilde{c}_n \equiv (\Gamma/\hbar)C_n$ для исключения Γ из последующих расчетов и будем искать нелинейные решения с несущей частотой Ω в виде

$$\tilde{b}_n = b_n \exp(-i\Omega t/2), \quad \tilde{c}_n = c_n \exp(-i\Omega t). \tag{14}$$

Тем самым мы ограничиваемся рассмотрением «стоячего» солитона. После подстановки (14) в (10a) находим c_n как функцию b_n

$$c_n = \frac{1}{2}\left(\frac{\Omega}{2} - \omega_b - v_b\frac{b_{n-1}+b_{n+1}}{b_n}\right). \tag{15}$$

Последующая подстановка c_n в (10b) дает соответствующее уравнение для b_n

$$(\Omega-\omega_c)\left(\frac{\Omega}{2} - \omega_b - v_b\frac{b_{n-1}+b_{n+1}}{b_n}\right) - \\ - v_c\left[2\left(\frac{\Omega}{2}-\omega_b\right) - v_b\left(\frac{b_{n-2}+b_n}{b_{n-1}} + \frac{b_n+b_{n+2}}{b_{n+1}}\right)\right] = 2b_n^2. \tag{16}$$

Система уравнений (16) инвариантна относительно изменения знака b_n, т. е. замены b_n на $-b_n$. Поэтому в дальнейшем, если это не указано отдельно, обсуждаются только решения с определенной фиксированной последовательностью знаков b_n. Естественно, в полный набор решений входят и решения с противоположными знаками b_n.

Система уравнений (10) при $N_0 = 2, 4$ имеет точные аналитические решения, которые могут быть использованы для выяснения основных тенденций в систематике решений при увеличении числа пар ВС в цепочке $N_0 > 4$. Для $N_0 = 2$ (две пары ВС) восемь аналитических решений b_n $(n = 1, 2)$ подразделяются на два симметричных решения относительно центра двух пар ВС

$$b_1 = b_2 = \pm\sqrt{(D^{(2)}-P)/2 + Q/2}, \quad D^{(2)} = (\Omega-\omega_c-v_c)(\Omega/2-\omega_b), \tag{17}$$

где

$$P = v_b(\Omega-\omega_c), \qquad Q = v_b v_c,$$

и два антисимметричных относительно этого центра

$$b_1 = -b_2 = \pm\sqrt{(D^{(2)}+P-Q)/2}. \tag{18}$$

Подобные симметричные и антисимметричные состояния существуют и в линейной теории колебаний. Вместе с тем остальные четыре решения (и это результат нелинейности уравнений) являются генетически началом решений солитонного типа. Эти решения имеют вид

$$b_1 = \pm\sqrt{(D^{(2)} - Px + Q/x)/2}, \quad b_2 = b_1/x, \tag{19}$$

где $x = x_{1,2} = y \pm \sqrt{y^2-1}$, $y \equiv D^{(2)}(2P)^{-1}$.

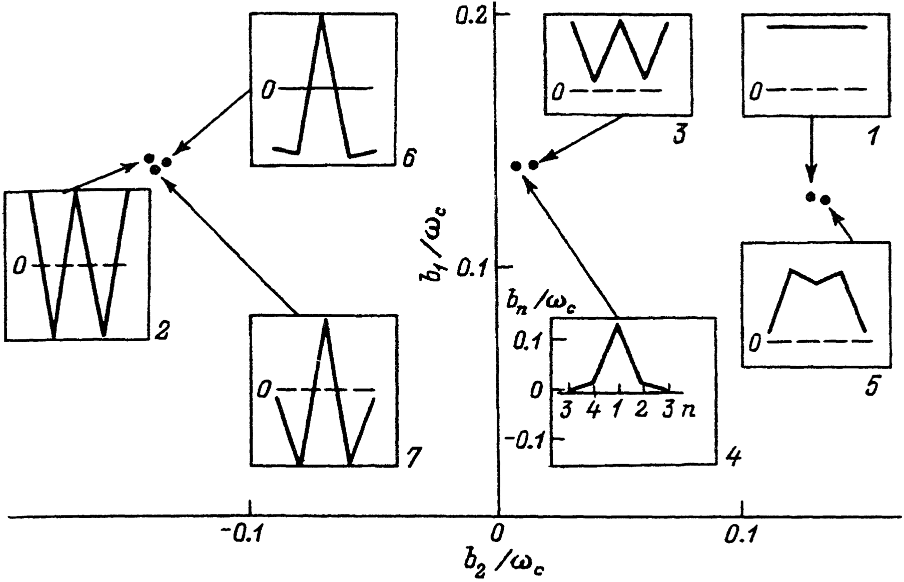

Рис. 2. Огибающие нелинейных волн. $N_0 = 4$.

Четыре последних решения являются фактически топологически единственным солитонным решением $b_1 > b_2 > 0$, не симметричным относительно центра двух ВС пар, и его зеркальными отображениями при заменах $b_1 \rightleftarrows b_2$ и $b_n \to -b_n$. Соответствующие решениям (19) значения c_n получаются автоматически из (15).

Для $N_0 = 4$ все 24 решения для b_1, b_2, b_3 также подразделяются на симметричные решения $b_1 = b_2$ и, кроме того, решения солитонного типа, не имеющие такой симметрии. Мы не рассматриваем здесь особую точку $b_1 = -b_3$, $b_2 = 0$. Симметричные состояния отвечают решениям

$$b_1 = b_2 = b_3 = \pm\sqrt{(D - P + 4Q)/2}, \tag{20a}$$

$$b_1 = -b_2 = b_3 = \pm\sqrt{(D + P - 4Q)/2}, \tag{20b}$$

$$b_1 = xb_2 = b_3 = \pm\sqrt{(D - 2P/x + 4xQ)/2}, \tag{20c}$$

где для решений (20c) величина x имеет два значения

$$x = y \pm \sqrt{y^2 - 1}, \quad y = \frac{D}{4P}, \quad D \equiv (\Omega - \omega_c - 2v_c)(\Omega/2 - \omega_b).$$

Остальные 16 решений солитонного и квазисолитонного типа имеют вид

$$b_1 = \frac{x}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{x}{2}^2\right) - y}, \quad b_3 = \frac{y}{b_1}, \quad b_2 = \frac{1}{P} b_1 b_3 (b_1 + b_3), \tag{21}$$

где $x = \pm\sqrt{\frac{D}{2} + y + \frac{PQ}{y}}$, а величина y является решением уравнения четвертой степени

$$y^4 + (D/2)y^3 - [DP(P+Q)/2]y + P^2[P^2/2 - Q^2] = 0. \tag{22}$$

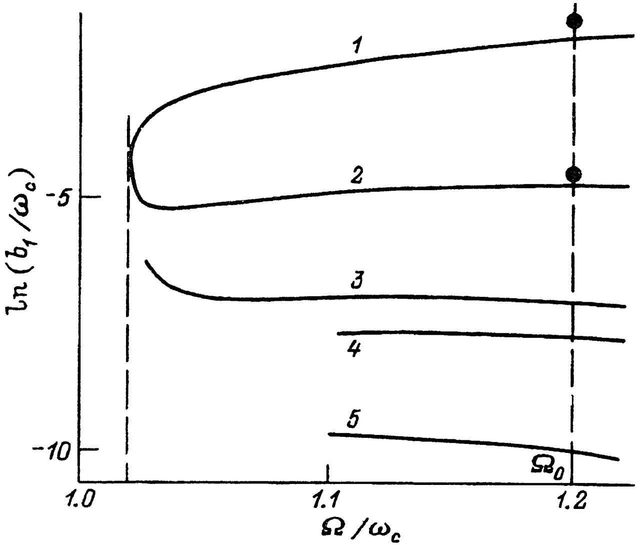

Рис. 3. Зависимость огибающей $b_n(\Omega)$ $n = 1, 2, \ldots$ солитона от несущей частоты Ω.

Зависимости b_n для всех найденных при $N_0 = 4$ решений представлены соответствующими графиками на вставках на рис. 2. На этом рисунке в верхней полуплоскости $b_1 > 0$, b_2 жирными точками представлены пары b_1/ω_c, b_2/ω_c, являющиеся решениями (20), (21). Удобство такого представления решений в плоскости b_1, b_2 видно из последующего изложения, где будет показано, что значения $b_3, b_4, \ldots, b_n$ $(n > 2)$ определяются именно значениями b_1 и b_2. Для рис. 2 выбраны параметры, близкие к использованным в [8,9]: $\omega_b/\omega_c = 0.4$, $v_b/\omega_c = v_c/\omega_c = 0.01$, $\Omega/\omega_c = 1.2$. Вставки *1–3* отвечают симметричным решениям (20). Вставки *4–7* отвечают солитонному решению (вставка *4*) и квазисолитонным решениям (вставки *5–7*). На вставке *4* показан порядок изменения n в зависимости b_n, связанный с представлением в виде замкнутой цепочки.

Представляет интерес для аналитического решения (21) (см. вставку *4* на рис. 2), отвечающего солитону при $N_0 = 4$ и являющегося развитием солитонного решения (19) при $N_0 = 2$, проследить зависимости $b_n(\Omega)$ с целью выяснить, является ли необходимым полученное в [8,9] жесткое условие (13) на частоту Ω. На рис. 3 представлены зависимости $\ln b_n(\Omega)$. Кривые *1–3* отвечают соответствующим зависимостям $\ln b_{1,2,3}(\Omega)$. При $\Omega \to \omega_c + 2v_c$ эти кривые сходятся в одну точку на низкочастотной границе области существования солитонов. Жирными точками на рис. 3 представлено решение $b_1 = B(z = 0)$, $b_2 = B(z = a)$, где a — постоянная решетки, полученное в [8,9] при жестком условии на частоту $\Omega = \Omega_0$ (13). При данных параметрах частота $\Omega_0/\omega_c = 1.2$. Аналитический расчет показывает, что в этой точке отношения $b_n/c_n = \gamma_n$ равны $\gamma_1 = 1.414$, $\gamma_2 = 1.414$, $\gamma_3 = 1.412$ ($\beta = 2^{-1/2}$ см. (12)), т. е. различаются в четвертой значащей цифре. В соседней низкочастотной точке $\Omega/\omega_c = 1.18$ эти отношения равны $\gamma_1 = 1.37$, $\gamma_2 = 1.31$, $\gamma_3 = 1.24$, т. е. существенно различаются уже во второй значащей цифре, причем $\gamma_1 > \gamma_2 > \gamma_3$. Справа от точки (13) в высокочастотной области при $\Omega/\omega_c = 1.22$ эти отношения равны $\gamma_1 = 1.45$, $\gamma_2 = 1.51$, $\gamma_3 = 1.58$, т. е. отличие, так же как и при $\Omega/\omega_c = 1.18$, во второй значащей цифре, но $\gamma_1 < \gamma_2 < \gamma_3$. Такая зависимость b_n/c_n вблизи точки Ω_0 доказывает, что при $\Omega = \Omega_0$ существует пропорциональность $b_n \sim c_n$, которая и была существенно использована в [8,9]. И при $\Omega < \Omega_0$, и при $\Omega > \Omega_0$ это условие пропорциональности явно нарушается, теория [8,9] неприменима, однако, как видно из рис. 3, никаких принципиальных изменений в зависимости $b_n(\Omega)$ не происходит. Остальные кривые на рис. 3 обсуждаются далее.

При $N_0 = 6$ на пространстве b_1, b_2, b_3, b_4 можно найти аналитически нелинейные решения симметричного типа $b_1 = b_4$, $b_2 = b_3$, антисимметричного типа $b_1 = -b_4$, $b_2 = -b_3$ и нелинейные решения симметрии $b_1 = b_3$, $b_2 = b_4$. В этих случаях система четырех уравнений сводится к более простой системе двух уравнений. Симметричные решения имеют вид

$$b_1 = b_4 = \pm\sqrt{(D - 2P/x + 2Qx + 2Q)/2}, \quad b_2 = b_3 = b_1/x, \qquad (23)$$

где величина $x = 1$ или x является решением кубического уравнения

$$(Q - P)x^3 + (D + 2Q - 2P)x^2 + (D + 2Q - 2P)x - 2P = 0.$$

Антисимметричные решения имеют вид

$$b_1 = -b_4 = \pm\sqrt{(D - 2P/y + 2Qy - 2Q)/2}, \quad b_2 = -b_3 = b_1/y, \qquad (24)$$

где величина y является решением уравнения четвертой степени

$$(Q - P)y^4 + (D + P - Q)y^3 - (D - 2Q)y + 2P = 0.$$

Решения симметрии $b_1 = b_3$, $b_2 = b_4$ имеют вид

$$b_1 = b_3 = \pm\sqrt{(D - 2P/x + 4Qx)/2}, \quad b_2 = b_4 = b_1/x, \qquad (25)$$

где x является решением квадратного уравнения

$$2Px^2 - Dx + 2P = 0.$$

К решениям последнего типа относится и решение

$$b_1 = -b_2 = b_3 = -b_4 = \pm\sqrt{(D + 2P - 4Q)/2}. \qquad (26)$$

Точное знание этих аналитических решений позволяет проконтролировать приводимые ниже численные расчеты по алгоритму, использующему рекуррентную процедуру. Некоторые из аналитических решений (23)–(26) представлены на рис. 4.

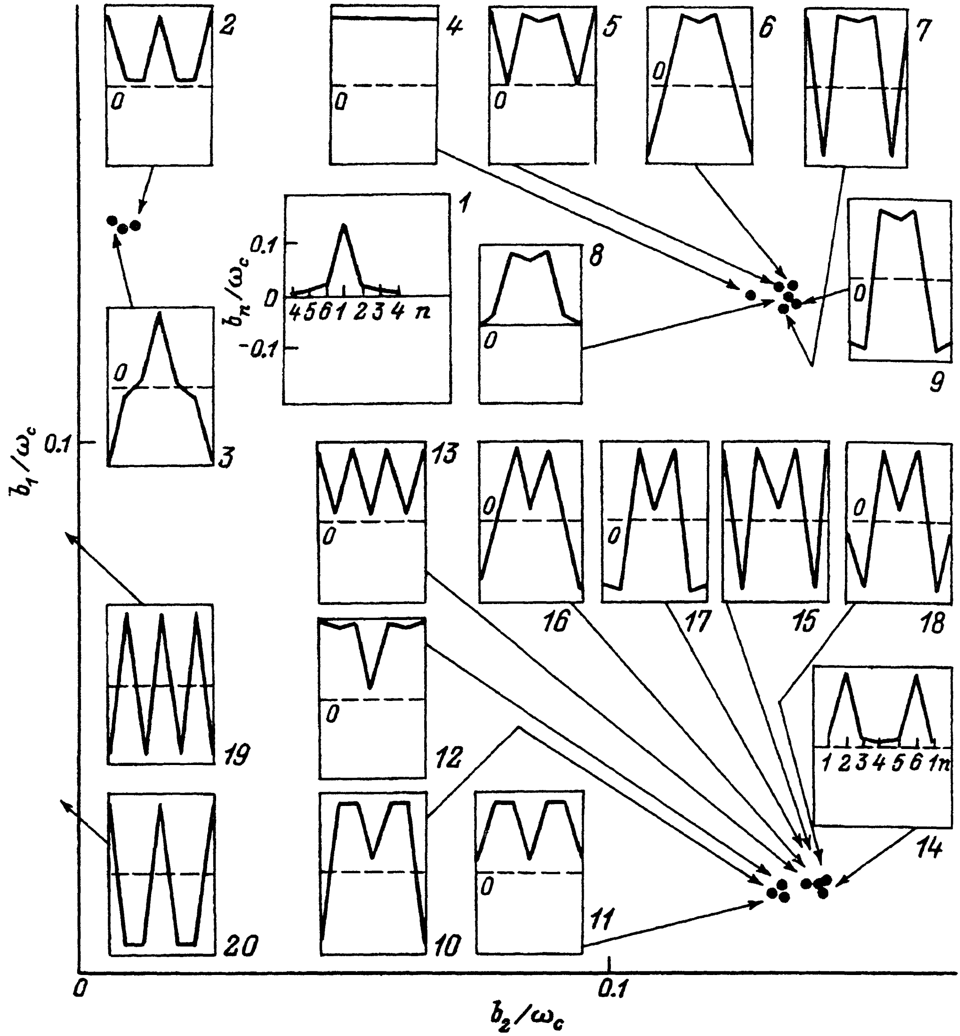

Рис. 4. Огибающие нелинейных волн. $N_0 = 6$.

При $N_0 > 4$ можно воспользоваться рекуррентностью дискретного представления (10). Обратим внимание на то, что из (16) при фиксированном Ω и данных b_{n-2}, b_{n-1}, b_n, b_{n+1} можно вычислить величину $b_{n+2}(\Omega)$

$$b_{n+2} = \frac{b_{n+1}}{v_b v_c}\left[v_b \Omega_c \frac{b_{n-1} + b_{n+1}}{b_n} + 2b_n^2 - D - v_c v_b \frac{b_{n-2} + b_n}{b_{n-1}} - v_c v_b \frac{b_n}{b_{n+1}}\right], \tag{27}$$

где $\Omega_c = \Omega - \omega_c$.

Таким образом, $b_m(\Omega)$ вычисляется через четыре предыдущих $b_{m'}(\Omega)$, $m' = m-1, m-2, m-3, m-4$. На старте этой процедуры достаточно двух величин b_1 и b_2, так как $b_{1-1} \equiv b_{N_0} \equiv b_2$ по симметрии и b_3 вычисляется из первого уравнения (16) с $n = 1$. Из последующих

$N-3$ уравнений с $n=2,3,\ldots,N-2$ по формуле (27) определяются $b_4, b_5, \ldots, b_N$. Последние два уравнения (16) с $n=N-1$, N являются фактически двумя уравнениями для определения двух неизвестных b_1, b_2. Они имеют следующий вид:

$$F_1(b_1,b_2) \equiv \Omega_c v_b \frac{b_{N-2}+b_N}{b_{N-1}} - v_c v_b \left(\frac{b_{N-3}+b_{N-1}}{b_{N-2}} + \frac{2b_{N-1}}{b_N}\right) + 2b_{N-1}^2 - D = 0,$$

$$F_2(b_1,b_2) \equiv \Omega_c v_b \frac{2b_{N-1}}{b_N} - 2v_c v_b \left(\frac{b_{N-2}+b_N}{b_{N-1}}\right) + 2b_N^2 - D = 0. \qquad (28)$$

Эта система уравнений относительно легко решается численно. По найденным из (28) корням $b_1(\Omega)$, $b_2(\Omega)$ вновь с помощью той же рекуррентной процедуры определяются для данного решения и все значения $b_n(\Omega)$, $n=3,4,5,\ldots,N$. Этот алгоритм был реализован для $N_0=6, 8, 10$ на ЭВМ средней мощности ЕС-1066. Вместе с аналитическими решениями для $N_0=2, 4$ это дает общую систематику нелинейных решений для интерфейса.

На рис. 4 представлены результаты расчета огибающих нелинейных волн по приведенной выше схеме. Далее величины b_n приводятся в единицах ω_c, т. е. $b_n/\omega_c \to b_n$. Показан первый квадрант плоскости $b_1 \geqslant 0$, $b_2 \geqslant 0$. Топологически эквивалентные по преобразованию $n \rightleftarrows N-n+1$ решения не показаны. Жирными кружками представлены решения b_1, b_2, полученные численным решением системы уравнений (28) с величинами $b_3, b_4, \ldots, b_N$, определенными из (27) при $n=3,4,\ldots,N-2$. Соответствующие этим точкам (в направлении стрелок) пространственные зависимости b_n представлены для каждого решения отдельно на соответствующих вставках. Мы ограничимся обсуждением только наиболее интересных решений. Эти решения в плоскости b_1, b_2 расположены кластерами: в первом кластере — решения *1–3* ($b_1 \cong 0.14$, $b_2 \cong 0.01$), во втором — решения *4–9* ($b_1 \cong b_2 \cong 0.14$), в третьем — решения *10–18* ($b_1 \cong 0.01$, $b_2 \cong 0.14$). Решению, соответствующему солитону, полученному в [8,9], отвечает соответствующий корень (вставка *1*) в первом кластере. Генезис развития этого решения при увеличении N_0 очевидно из сравнения решений (19) для $N_0=2$, $b_1=0.14$, $b_2=0.008$, решений (21) для $N_0=4$ (рис. 2), $b_1=0.14$, $b_2=0.0074$, $b_3=0.00075$ и рис. 4 для $b_1=0.14$, $b_2=7.4\cdot10^{-3}$, $b_3=3.7\cdot10^{-4}$, $b_4=3.7\cdot10^{-5}$. Из этого и из расчетов с $N_0=8, 10$ следует, что для солитонного решения (вставка *1* на рис. 4) увеличение N_0 приводит только к наращиванию «хвоста» и слабому изменению в максимуме амплитуды. Такая закономерность видна и из рис. 3, где кривые *4* и *5* представляют зависимости $b_3(\Omega)$, $b_4(\Omega)$ и кривые *1* и *2*, ранее отвечавшие b_1, b_2 для $N_0=4$, представляют и b_1, b_2 для $N_0=6$, поскольку разница в этих кривых для $N_0=4$ и 6 меньше толщины этих кривых. Кривые *4, 5* представляют $\ln b_{3,4}(\Omega)$ только вблизи $\Omega=\Omega_0$. Вставки *2, 3* (рис. 4) отвечают симметричным (2) и антисиммитричным (3) решениям, рассмотренным выше аналитически. На вставке *4* представлено стационарное решение $b_n=(D/2-P+2Q)^{1/2}=0.127$ второго кластера. Это решение существует при всех $N_0 \geqslant 4$. Во втором кластере среди решений *5–9* присутствуют как антисимметричные (9), так и квазисолитонные (8) решения без симметрии. В третьем кластере представляет интерес обсуждающийся в литературе так называемый «темновой» солитон, имеющий не максимум в зависимости b_n от n на бесконечной цепочке, а минимум. Этому решению в нашем случае отвечает, очевидно, решение (12). Среди решений *10–18* присутствуют как решения симметричного типа (11), антисимметричного типа (18), так и решения (13) симметрии $b_1 = b_3$, $b_2 = b_4$, рассмотренные выше в (25). С увеличением N_0 среди полного набора решений, поскольку система уравнений (16) решается точно, должны появляться решения, отвечающие бисолитону с двумя пиками, трисолитону с тремя пиками и т. д. Решение *14* является, очевидно, началом в генерации бисолитонных решений. На вставке *14* для графического сравнения, например, с видом нелинейных решений Тода произведена циклическая перестановка позиций пар ВС. По-видимому, с ростом N_0 будут появляться 3, 4, 5... солитонные решения. Вставки *19*, *20* демонстрируют решения из квадранта $b_1 > 0$, $b_2 < 0$ и относятся к симметрии $b_1 = b_3$, $b_2 = b_4$ и $b_1 = b_4$, $b_2 = b_3$ соответственно.

Из рис. 2, 4 видно, что число нелинейных волн быстро нарастает с увеличением N_0, что очевидным образом связано с нелинейным характером соответствующих уравнений. Анализ полученных решений, представленных на необсуждавшихся вставках, выяснение их соответствующего физического смысла не являлось целью данной работы и предполагается в будущем. На наш взгляд, предлагаемая процедура численного решения (28) с использованием рекуррентного метода позволяет в принципе найти абсолютно все решения системы нелинейных уравнений (10), и ограничения в этом связаны только с мощностью ЭВМ. Предложенный алгоритм дает возможность точно определить форму огибающих, частотные характеристики и т. д. для известных нелинейных волн типа солитонов и мультисолитонов и, кроме того, позволяет найти принципиально новые типы колебаний, которые должны быть в дальнейшем исследованы аналитически.

В заключение авторы считают своим долгом выразить искреннюю признательность В.М. Аграновичу и А.М. Камчатнову за полезные обсуждения.

Список литературы

[1] So F.F., Forrest S.R., Shy Y.Q., Steier W.H. Appl. Phys. Lett. **56**, 7, 674 (1990).
[2] So F.F., Forrest S.R. Phys. Rev. Lett. **66**, *20*, 2649 (1991).
[3] Agranovich V.M. Mol. Cryst. Liq. Cryst. **230**, *1*, 13 (1993).
[4] Agranovich V.M., Atanasov R.D., Bassani G.F. Chem. Phys. Lett. **199**, 6, 621 (1992).
[5] Agranovich V.M. Physica Scripta **49**, 6, *699* (1993).
[6] Agranovich V.M., Dubovsky O.A. Chem. Phys. Lett. **210**, 4–6, *458* (1993).
[7] Agranovich V.M., Page J.B. Phys. Lett. **A183**, 5/6, 395 (1993).
[8] Агранович В.М., Камчатнов А.М. Письма в ЖЭТФ **59**, *6*, 397 (1994).
[9] Agranovich V.M., Dubovsky O.A., Kamchatnov A.M. J. Phys. Chem. **98**, *51*, 13607 (1994).