1990 ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА Том 32, № 7
1990 SOLID STATE PHYSICS Vol. 32, N 7

УДК 538.9

СОЛИТОНЫ В АТОМНОЙ ЦЕПОЧКЕ, ПОДВЕРЖЕННОЙ ВНЕШНЕЙ РАСТЯГИВАЮЩЕЙ СИЛЕ

Р. Х. Сабиров

Исследовано влияние внешней силы растяжения на распространение солитонов в атомной цепочке с кубическим и квартетным ангармонизмом. Свойства солитонов существенно определяются величиной $b=\gamma\alpha/\beta^2$, где α — упругая постоянная; β, γ — параметры ангармонизма 3-го и 4-го порядков. При $b < 3/8$ внешняя сила уменьшает амплитуды солитонов растяжения и сжатия, причем при определенной величине силы в решетке отсутствуют солитоны сжатия. При $b=3/8$ возможна ситуация, когда в решетке вообще нет солитонов. При $b > 3/8$ с ростом силы вначале происходит выравнивание амплитуд солитонов растяжения и сжатия с последующим их ростом. При этом амплитуда солитонов сжатия начинает превышать амплитуду солитонов растяжения (при нулевой силе наблюдается обратная картина).

1. В работе автора [1] исследовано распространение солитонов в атомной цепочке с кубическим и квартетным ангармонизмом, на концы которой действует постоянная растягивающая сила F. Потенциальная энергия такой системы равна

$$U=\sum_{n=1}^{N}\varphi(R_{n,\,n-1})-F\sum_{n=1}^{N}{}_{n,\,n-1},\qquad R_{n,\,n-1}=R_n-R_{n-1},$$

$$\varphi(R_{n,\,n-1})=\varphi(a)+\alpha(R_{n,\,n-1}-a)^2-\beta(R_{n,\,n-1}-a)^3+\gamma(R_{n,\,n-1}-a)^4, \tag{1}$$

где R_n — координата n-го атома; a — равновесное межатомное расстояние при $F=0$; α — упругая постоянная; β, γ — постоянные, характеризующие ангармонизм 3-го и 4-го порядков. В [1] в континуальном приближении для солитонных решений ($C > 0$) получено

$$Z=-2C\left\{\left(-|B|+\sqrt{B^2+4AC}\right)\mathrm{sh}^2\left[\frac{\sqrt{C}}{2}(x+x_0)\right]+\right.$$
$$\left.+\left(|B|+\sqrt{B^2+4AC}\right)\mathrm{ch}^2\left[\frac{\sqrt{C}}{2}(x+x_0)\right]\right\}^{-1},\quad 0>Z>Z_2, \tag{2}$$

$$Z=2C\left\{\left(|B|+\sqrt{B^2+4AC}\right)\mathrm{sh}^2\left[\frac{\sqrt{C}}{2}(x+x_0)\right]+\right.$$
$$\left.+\left(-|B|+\sqrt{B^2+4AC}\right)\mathrm{ch}^2\left[\frac{\sqrt{C}}{2}(x+x_0)\right]\right\}^{-1},\quad Z_1>Z>0, \tag{3}$$

где

$$Z_1=\frac{1}{2A}\left(|B|+\sqrt{B^2+4AC}\right),\qquad Z_2=\frac{1}{2A}\left(|B|-\sqrt{B^2+4AC}\right),$$

$$A=12\frac{\gamma}{ak_2},\quad B=12\frac{\beta k_3}{ak_2 l},\quad C=\frac{12}{l^2}\left(\frac{V^2}{v^2}-1\right),\quad l=a+a_0, \tag{4}$$

а величины k_2, k_3, a_0 определяются соотношениями

$$k_2 = 1 - 3y + 6by^2, \quad k_3 = -1 + 4by, \quad b = \frac{\gamma a}{\beta^2}, \quad 12by^3 - 9y^2 + 6y - \frac{F}{F_{\text{пр}}} = 0,$$

$$a_0 = \frac{\alpha}{\beta} y, \quad F_{\text{пр}} = \frac{\alpha^2}{3\beta}. \tag{5}$$

В (4) V — скорость солитона, $v = \sqrt{2\alpha k_2/ml}$ — скорость звука в нагруженной решетке с массой атомов m. Решения (2), (3) записаны для $B \leqslant 0$. Для получения решений при $B > 0$ в (2), (3) необходимо поменять перед фигурными скобками знаки на противоположные и считать, что эти решения имеют место при $-Z_2 > Z > 0$ и $0 > z > -Z_1$ соответственно.

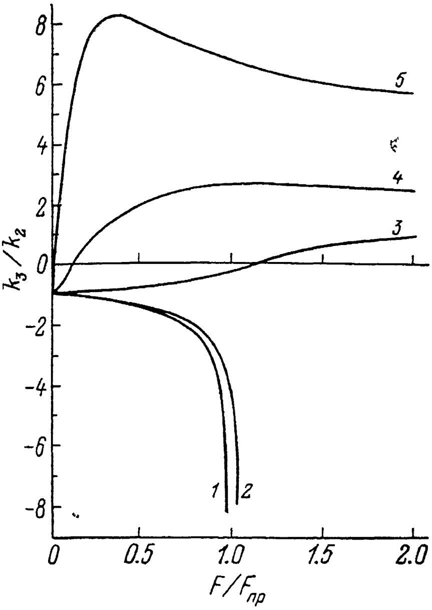

Рис. 1. Зависимость параметра k_3/k_2 от внешней силы F.

b: 1 — 0.01, 2 — 0.1, 3 — 1.0, 4 — 10, 5 — 100.

Влияние силы F на распространение солитонов в решетке проявляется через зависимость от F величин k_2, k_3 и l. В [1] дан анализ формул (2), (3)

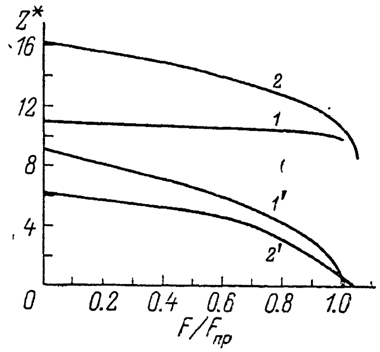

Рис. 2. Зависимость величины Z^* от внешней силы F.

1, 2 — солитоны растяжения; 1', 2' — солитоны сжатия. Кривая 1 дана в масштабе 10^{-1} Z^*.

для случаев, когда либо $\gamma = 0$, либо $k_3 = 0$, либо $k_2 \to 0$. В настоящей работе проводится подробный анализ (2), (3) с привлечением численного расчета.

2. Прежде всего заметим, что нас интересуют лишь такие ветви решения уравнения (5) для y, которые при $F \to 0$ непрерывно переходят в нуль. При $b > 3/8$ такое решение существует независимо от величины F, а при $b < 3/8$ лишь до значений

$$E^* = \frac{3}{2b}\left[1 - \frac{1}{4b} - \frac{2}{3}\left(1 - \frac{3}{8b}\right)\sqrt{1 - \frac{8}{3}b}\right] F_{\text{пр}}. \tag{6}$$

Как отмечено выше, характер солитонных решений определяется знаком B (4). Так, при $B < 0$ решение (2) описывает солитон сжатия, а (3) — растяжения. Расчет параметра k_3/k_2, определяющего при фиксированных α и β знак B, приведен на рис. 1 (считаем α, β, $\gamma > 0$). При $b < 3/8$ знак k_3/k_2 отрицателен, причем $k_3/k_2 \to -\infty$ при $F \to F^*$. При $b > 3/8$ при силе $F_0 = 3F_{\text{пр}}\,(4b-1)/8b^2$ происходит изменение знака k_3/k_2.

Рассмотрим зависимость от F величины $Z^*(x) = (\beta l/\alpha)\, Z(x)$, где $Z(x)$ описывает деформацию (локальную) атомной цепочки, согласно (2), (3). Пусть $b < 3/8$. Тогда при изменении F от 0 до F^* (6) для солитонов сжатия наблюдается монотонное уменьшение амплитуды $Z^* = |Z^*_{(0)}|$ от

$$Z^*_- = 2\,(V^2/v^2 - 1)\left[1 + \sqrt{1 + 4b\,(V^2/v^2 - 1)}\right]^{-1} \tag{7}$$

до нуля, а для солитонов растяжения от

$$Z_{+}^{*}=2\,(V^2/v^2-1)\,[-1+\sqrt{1+4b\,(V^2/v^2-1)}]^{-1} \tag{8}$$

до

$$Z_{1+}^{*}=\frac{1}{b}\sqrt{1-{}^{8}/_{3}\,b}. \tag{9}$$

На рис. 2 дана зависимость Z^* от F для $V^2/v^2=11$ и $b=0.01$ (*1*, *1'*), 0.1 (*2*, *2'*). Солитоны растяжения всегда имеют большую амплитуду. На рис. 3 представлены данные расчета по (2)—(5) величин Z^* (x) (при $b=0.01$ $Z^*=109.2$ и 99.4 соответственно для $F=0$ и $F_{\text{пр}}$). Данные для $b=0.01$ и $F=F_{\text{пр}}$ близки к ситуации, когда в решетке нет солитонов сжатия, что точно реализуется при $F=F^*=1.0044\,F_{\text{пр}}$. Отметим, что при этом солитоны растяжения, обладая амплитудой Z_{1+}^*, имеют очень маленькую ширину. Солитонные решения чувствительны к величине b. Любопытно, что при $b=3/8$ и $F=(4/3)\,F_{\text{пр}}$ в решетке отсутствуют солитоны как сжатия, так и растяжения.[1]

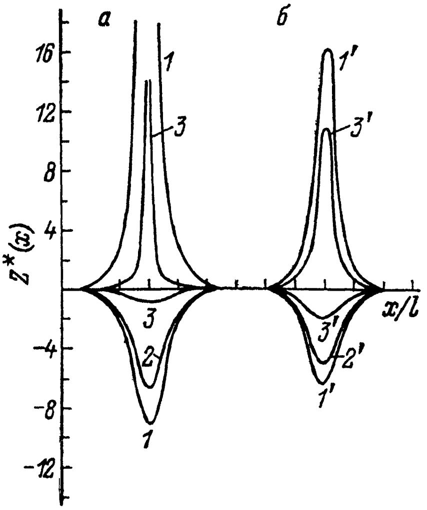

Рис. 3. Солитонные решения $Z\,(x)$ для $V^2/v^2=11$ и $b=0.01$ (*а*) и 0.1 (*б*).

1, *1'* — $F=0$; *2*, *2'* — $F=0.5\,F_{\text{пр}}$; *3*, *3'* — $F=F_{\text{пр}}$. Масштаб по оси x равен 0.25.

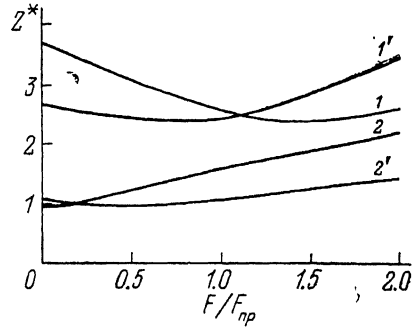

Рис. 4. Зависимость величины Z^* от внешней силы F.

1, *2* — солитоны растяжения; *1'*, *2'* — солитоны сжатия.

Пусть $b>3/8$. Здесь при $F<F_0$ параметр $k_3/k_2<0$, а при $F>F_0$ $k_3/k_2>0$. При $F=F_0$ солитоны сжатия и растяжения имеют равные амплитуды

$$Z_{2\pm}^{*}=\sqrt{\frac{1}{b}\left(1-\frac{3}{8b}\right)\left(\frac{V^2}{v^2}-1\right)}. \tag{10}$$

На рис. 4 дана зависимость Z^* от F при $V^2/v^2=11$ и $b=1$ (*1*, *1'*), 10 (*2*, *2'*). Можно заметить, что если до величины F_0 большей амплитудой обладают солитоны растяжения, то при $F>F_0$ — солитоны сжатия. При этом при $F\to\infty$ их амплитуды стремятся к бесконечности согласно

$$Z_{\infty}^{*}=\frac{3}{2}\left(\frac{1}{12b}\,\frac{F}{F_{\text{пр}}}\right)^{1/3}\left(\frac{V^2}{v^2}-1\right)\left[\pm1+\sqrt{1+\frac{3}{2}\left(\frac{V^2}{v^2}-1\right)}\right]^{-1}. \tag{11}$$

Знаки «+» и «—» в (11) берутся соответственно для солитонов растяжения и сжатия. Как видно из рис. 4, зависимость Z^* от F проходит через минимум, который наиболее ярко выражен для малых b.

3. Из расчета следует, что внешняя растягивающая сила оказывает существенное влияние на свойства солитонов в решетке. Так, при $b\leqslant 3/8$ сила уменьшает амплитуды солитонов сжатия и растяжения, причем роль «больших» солитонов здесь принадлежит солитонам растяжения.

[1] При $b=3/8$ для (2), (3) имеем $Z\,(x)=|1-(2/3)y|Z_{F=0}\,(x)$, но в $Z_{F=0}\,(x)$ (2), (3) следует a заменить на l. При $y=2/3$ $Z\,(x)=0$.

Более того, при $F=F^*$ в решетке вообще нет солитонов сжатия, а при $b=3/8$ и $F=F^*$ отсутствуют и сжатия, и растяжения.

В случае $b > 3/8$ сила приводит к следующим результатам. Вначале при росте F до F_0 происходит выравнивание амплитуд солитонов сжатия и растяжения. При $F=F_0$ выражения (2), (3) совпадают с точностью до знака. Можно сказать, что здесь солитоны сжатия и растяжения являются зеркальноподобными. Значения F_0 сильно зависят от значений b. Так, при $b=1$, 10, 100 соответственно имеем $F=F_{\text{пр}}=1.125$, 0.146, 0.015. При дальнейшем росте F растут и амплитуды солитонов сжатия и растяжения. При этом роль «больших» солитонов переходит к солитонам сжатия (при $F=0$ наблюдается обратная картина). Важно отметить, что начиная с определенной величины F амплитуды солитонов превышают соответствующие значения для $F=0$. Можно сказать, что здесь сила «стабилизирует» солитоны, их амплитуды стремятся к бесконечности при $F \to \infty$.

Список литературы

[1] Сабиров Р. Х. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 4. С. 167—171.

Московский государственный
педагогический институт
им. В. И. Ленина
Москва

Поступило в Редакцию
27 ноября 1989 г.