

УДК 530. 1+532.59

©1995

ЩЕЛЕВЫЕ СОЛИТОНЫ В СИСТЕМАХ СО СЛОЖНОЙ МИКРОСКОПИЧЕСКОЙ СТРУКТУРОЙ

О.В.Усатенко, А.С.Ковалев, А.А.Вялов

Харьковский государственный университет,

810077, Харьков, Украина

(Поступила в Редакцию 28 июля 1994 г.

В окончательной редакции 27 марта 1995 г.)

Разработан метод нахождения решений для нелинейных локализованных возбуждений (щелевых солитонов) в ангармонических цепочках с произвольным числом атомов в элементарной ячейке. Рассмотрены щелевые солитоны в трехатомной ангармонической упругой цепочке. Показано, что они имеют структуру брегговских солитонов в нелинейных оптических средах с модулированными параметрами и существенно отличаются от таковых в двухатомной ангармонической цепочке.

В настоящее время широко исследуются специфические нелинейные локализованные возбуждения (щелевые солитоны) в средах с периодически пространственно модулированными параметрами, в которых спектр линейных волн обладает одной или несколькими щелями. Впервые эта проблема была рассмотрена применительно к нелинейной оптике в работе [1] (см. также [2,3]). В теории кристаллической решетки и нелинейных упругих волн естественным объектом, обладающим щелевым спектром и допускающим существование щелевых солитонов, является ангармоническая цепочка с многоатомной элементарной ячейкой. В простейшем случае двухатомного нелинейного упругого кристалла щелевые солитоны разного вида были исследованы в работах [4-6]. Следующим шагом в этом направлении, естественно, является исследование эволюции щелевых возбуждений с ростом числа атомов в элементарной ячейке. Во-первых, при этом возникает возможность проследить за эволюцией щелевых солитонов при переходе к макроскопически слоистым кристаллам и за преобразованием этих возбуждений в нелинейные поверхностные волны, локализованные вблизи плоских структурных дефектов. Во-вторых, на этом пути возможно найти ответ на вопрос о структуре солитонных решений в нелинейных неупорядоченных кристаллах. Как известно, один из подходов к проблеме неупорядоченных систем связан с квазикристаллами. Одномерные цепочки Фибоначчи являются хорошей моделью реальных трехмерных квазикристаллов. Фононный спектр таких цепочек представляет собой самоподобное множество, в котором почти каждая точка принадлежит запрещенному интервалу [7]. Представляет интерес вопрос о природе нелинейных возбуждений, возникающих

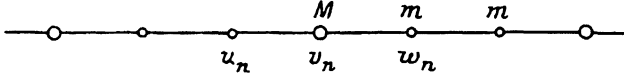


Рис. 1. Смещение атомов и распределение масс в элементарной ячейке трехатомной ангармонической цепочки.

в этой системе. Для изучения нелинейных динамических свойств цепочки Фибоначчи можно на первом этапе рассмотреть серии Фибоначчи на конечном интервале, продолжая последовательность периодически. Такая многоатомная цепочка превращается в квазикристалл, когда число атомов в элементарной ячейке стремится к бесконечности. Первым шагом является исследование двухатомной цепочки с чередующимися массами атомов и щелевых солитонов в ней. На следующем этапе этой программы мы рассмотрим трехатомную цепочку со следующим чередованием масс: $\dots m M m m M m \dots$. В данной работе мы выполним полный анализ нелинейных возбуждений в этой системе и укажем общий метод рассмотрения этой проблемы независимо от числа частиц в элементарной ячейке.

Рассмотрим одномерную скалярную модель трехатомной цепочки с ангармоническим потенциалом взаимодействия ближайших соседних атомов $U(\Delta) = A\Delta^2/2 + C\Delta^4/4$, где Δ — относительное смещение этих атомов. Будем считать постоянные A и C положительными. Введем обозначения u_n, v_n, w_n для смещений атомов с массами m, M, m , соответственно из элементарной ячейки с номером n (рис. 1).

В этих переменных уравнения движения имеют следующий вид:

$$m d^2 u_n / dt^2 + A(2u_n - v_n - w_{n-1}) + C(u_n - v_n)^3 + C(u_n - w_{n-1})^3 = 0,$$

$$M d^2 v_n / dt^2 + A(2v_n - w_n - u_n) + C(v_n - w_n)^3 + C(v_n - u_n)^3 = 0,$$

$$m d^2 w_n / dt^2 + A(2w_n - u_{n+1} - v_n) + C(w_n - u_{n+1})^3 + C(w_n - v_n)^3 = 0. \quad (1)$$

В линейном приближении закон дисперсии упругих волн вида $(u_n, v_n, w_n) = (u, v, w) \exp\{i(3kn - \omega t)\}$ имеет три ветви и две щели: нижнюю щель ($\omega_1 \leq \omega \leq \omega_2$), соответствующую волновому числу $k = \pi/3$, и верхнюю щель ($\omega_3 \leq \omega \leq \omega_4$) при $k = 2\pi/3$. В случае малого различия масс атомов в цепочке ($(M/m) - 1 = \varepsilon \ll 1$) частоты ω_i границ щелей просто выражаются через параметры A, m и M

$$(\omega_1^2, \omega_2^2, \omega_3^2, \omega_4^2) \cong A/m(1 - 2\varepsilon/3, 1, 3 - 2\varepsilon, 3), \quad M > m, \quad (\varepsilon > 0) \quad (i),$$

$$(\omega_1^2, \omega_2^2, \omega_3^2, \omega_4^2) \cong A/m(1, 1 - 2\varepsilon/3, 3, 3 - 2\varepsilon), \quad M < m, \quad (\varepsilon < 0) \quad (ii).$$

Закон дисперсии линейных волн в рассматриваемой трехатомной цепочке представлен на рис. 2.

В случае $\varepsilon \ll 1$, когда ширина щели имеет порядок величины ε , для солитонов с частотами, лежащими внутри щели или в близкой (порядка ε) окрестности щели, амплитуда щелевых солитонов мала (порядка величины $\sqrt{\varepsilon}$) [4] и можно использовать так называемое одночастотное (или резонансное) приближение. В этом приближении удобно ввести

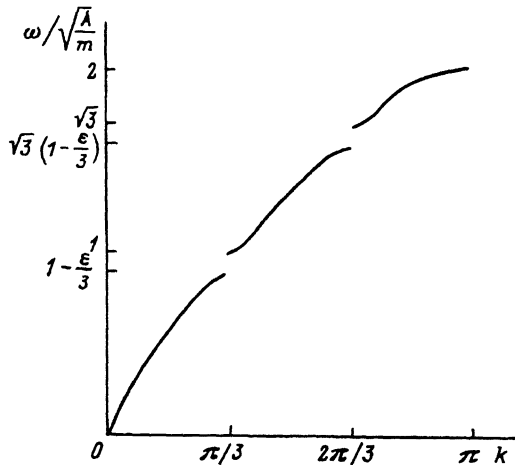


Рис. 2. Закон дисперсии линейных колебаний трехатомной цепочки.

медленно изменяющиеся в пространстве функции непрерывной координаты x

$$(u_n, v_n, w) \cong (u(x), v(x), w(x)) \sin(\omega t) \sqrt{4A/3C} \begin{cases} (-1)^n, & \text{нижняя щель,} \\ 1, & \text{верхняя щель.} \end{cases} \quad (2)$$

Для медленно изменяющихся функций (u, v, w) в континуальном пределе получается следующая система обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned} (2 - (m\omega^2/A))u - v \pm w + (u - v)^3 + (u \pm w)^3 &= \pm 3dw/dx, \\ (2 - (M\omega^2/A))v - u - w + (v - w)^3 + (v - u)^3 &= 0, \\ (2 - (m\omega^2/A))w - v \pm u + (w - v)^3 + (w \pm u)^3 &= -(\pm 3dw/dx), \end{aligned} \quad (3)$$

где знаки (\pm) относятся к верхней и нижней щели соответственно (заметим, что для нахождения решения с большей точностью и вычисления поправок порядка $\varepsilon^{3/2}$, необходимо учитывать вторые пространственные производные d^2/dx^2 , третьи гармоники $\sin(3\omega t)$ и пятые степени функций смещения). В общем случае цепочки с N атомами в элементарной ячейке задача сводится к исследованию системы типа (3) из двух дифференциальных уравнений первого порядка для крайних атомов в элементарной ячейке и $N - 2$ алгебраических уравнений.¹ После решения системы алгебраических уравнений остается стандартная система из двух дифференциальных уравнений первого порядка, обычно возникающая при исследовании щелевых солитонов в разных приложениях [1-6]. Например, в случае трехатомной цепочки для нижней

¹ В пространственно однородном случае при отбрасывании слагаемых с производными получается система уравнений для нахождения главных нелинейных колебаний замкнутой в кольцо конечной цепочки атомов, рассмотренная, например, в [8].

щели мы находим следующее решение уравнения (3) с точностью до $\varepsilon^{3/2}$:

$$v \cong (u - w) \left((m\omega^2/A + \varepsilon) \right) - (u^3 + w^3). \quad (4)$$

Подстановка этого выражения в уравнения (3) дает в случае $M > m$ для новых переменных

$$f = \sqrt{A/m}(w - u)/2, \quad \phi = \sqrt{3A/m}(w + u)/2, \quad z = (m/A\sqrt{3})x \quad (5)$$

систему двух связанных нелинейных уравнений

$$\begin{aligned} (\omega_2^2 - \omega^2) f + f(f^2 + \phi^2) &= -d\phi/dz, \\ (\omega_1^2 - \omega^2) \phi + \phi(f^2 + \phi^2) &= df/dz. \end{aligned} \quad (6)$$

Эти уравнения представляют собой гамильтонову систему уравнений для обобщенной координаты f , обобщенного канонически сопряженного импульса ϕ и сохраняющейся энергии

$$E = (\omega^2 - \omega_1^2) \phi^2/2 + (\omega^2 - \omega_2^2) f^2/2 + (f^2 + \phi^2)^2/4. \quad (7)$$

Динамическая система (6), (7) аналогична системе для нелинейной оптической среды со слабо модулированным в пространстве коэффициентом преломления [1]. Решения уравнений (6) для щелевых (Брегговских) солитонов хорошо известны [1-4]. Они соответствуют сепаратрисным кривым на поверхности $E = E(f, \phi)$ и для случая $\omega_1 \leq \omega \leq \omega_2$ изображены на рис. 3. В терминах исходных переменных это солитонное решение, которому соответствует значение $E = 0$, в области частот внутри нижней щели $\omega_1 \leq \omega \leq \omega_2$ имеет следующий вид:

$$\begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} = (m/3A)^{1/2} \frac{\beta\sqrt{\alpha} \operatorname{ch} \xi}{(\omega_1^2 - \omega_2^2) \operatorname{ch}^2 \xi - \alpha} \begin{cases} 1 + \sqrt{3\alpha/\beta} \operatorname{th} \xi, \\ 2, \\ 1 - \sqrt{3\alpha/\beta} \operatorname{th} \xi, \end{cases} \quad (8)$$

где $\alpha = \omega^2 - \omega_1^2$, $\beta = \omega_2^2 - \omega^2$, $\xi = \sqrt{\alpha\beta/3}(m/A)x$. В области частот $\omega \geq \omega_2$ сепаратрисное значение интеграла движения E равно $E = -(\omega_2^2 - \omega^2)^2/4$ и солитонное решение приобретает вид

$$\begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} = (m/3A)^{1/2} \frac{(\omega^2 - \omega_2^2)}{\sqrt{\alpha - \beta} \operatorname{ch} \eta \pm (\omega_2^2 - \omega_1^2)^{1/2}} \begin{cases} 1 - r \operatorname{sh} \eta, \\ 2, \\ 1 + r \operatorname{sh} \eta, \end{cases} \quad (9)$$

где $r = \{3(1 - \alpha/\beta)/2\}^{1/2}$ и $\eta = \{2\beta(\omega_1^2 - \omega_2^2)/3\}^{1/2}(m/A)x$.

Фазовый портрет для этого случая изображен на рис. 4.

Пространственное распределение смещений разных атомов элементарной ячейки в солитонных решениях в случае (8) (для $\omega_1 \leq \omega \leq \omega_2$) и случае (9) (для $\omega \geq \omega_2$) приведены на рис. 5 и 6 соответственно. Видно, что исследуемые щелевые и «околощелевые» солитоны представляют

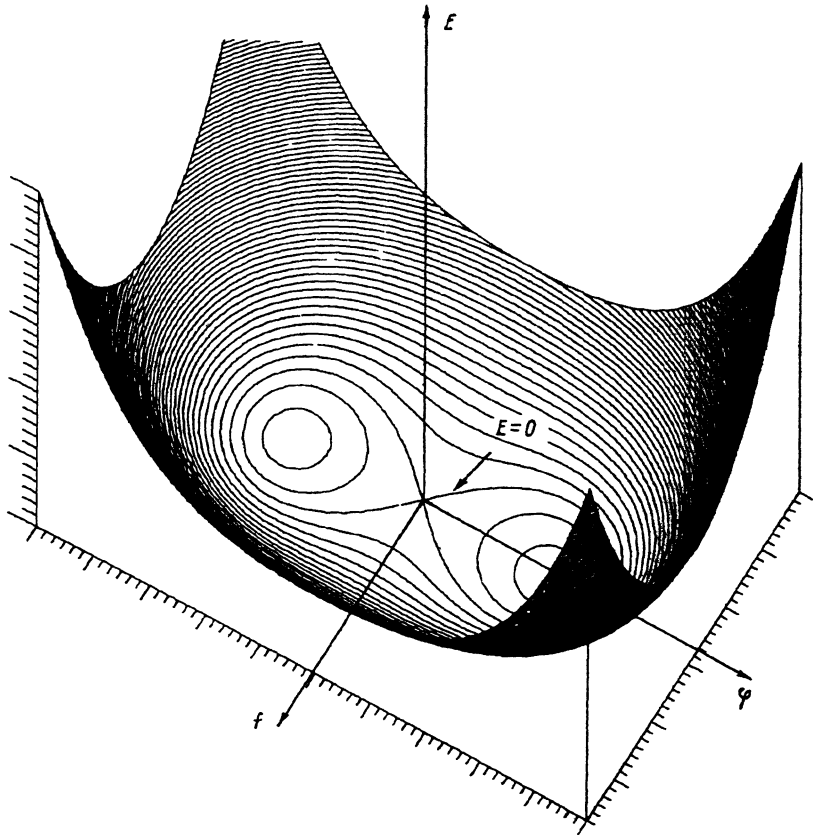


Рис. 3. Зависимость $E = E(f, \phi)$ при $\omega_1 \leq \omega \leq \omega_2$.

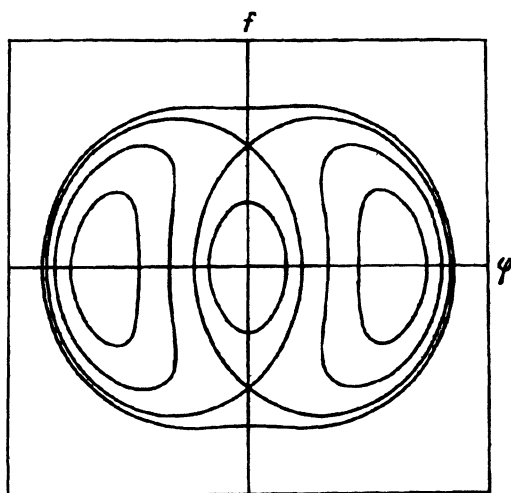


Рис. 4. Фазовый портрет системы (6) при $\omega_2 \leq \omega$.

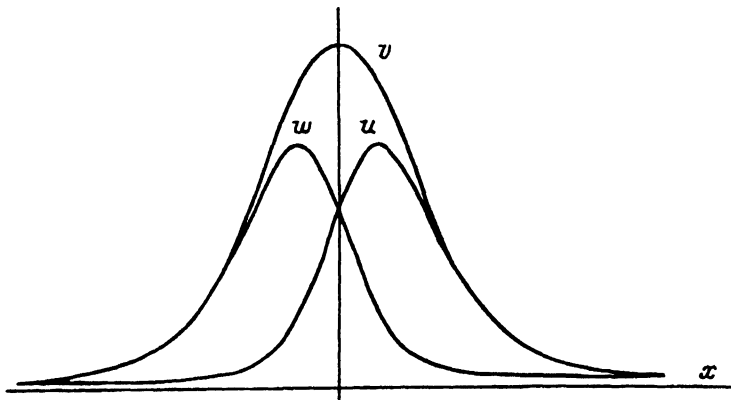


Рис. 5. Огибающие распределений смещений атомов в элементарной ячейке при $\omega_1 \leq \omega \leq \omega_2$.

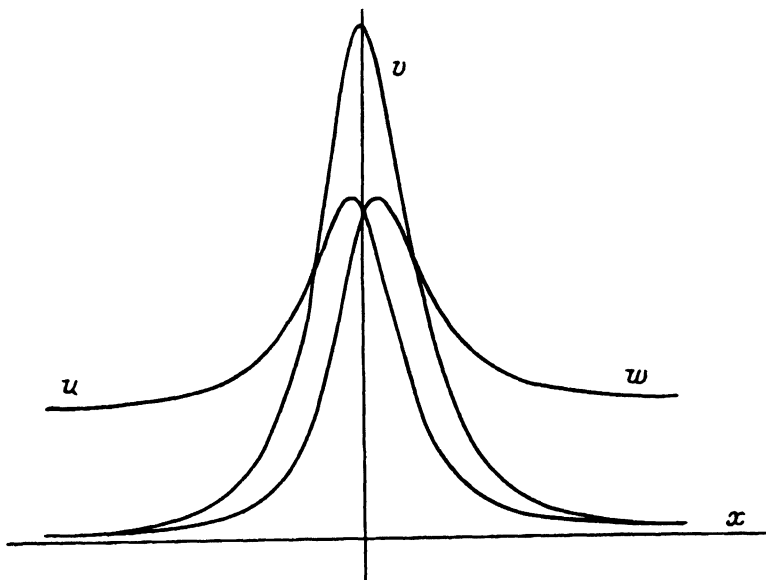


Рис. 6. Огибающие распределений смещений атомов в элементарной ячейке при $\omega_2 \leq \omega$.

собой сложную комбинацию солитонов огибающей двух ветвей спектра возбуждений, примыкающих к щели. В щелевых солитонах (рис. 5) с большей амплитудой колеблются тяжелые атомы и поля смещений всех атомов стремятся к нулю на бесконечности, т.е. эти решения представляют собой действительно пространственно локализованные возбуждения ангармонической цепочки. В случае окощелевых солитонов с $\omega \geq \omega_2$ (рис. 6) локализованное возбуждение существует на фоне незатухающих на бесконечности нелинейных колебаний легких атомов (поля u и v), т.е. представляет собой «солитон на пьедестале». Из этого рисунка видно, что при $x \rightarrow +\infty$ и $x \rightarrow -\infty$ в нелинейной стоячей волне колеблются разные атомы из элементарной ячейки, т.е. происходит сдвиг фазы колебания на одно межатомное расстояние. Но

в данном случае такой «кинк сдвига фазы» обязательно сопровождается локализованным в центре колебанием тяжелых атомов, и в пределе $m = M$ такое решение исчезает в отличие от ситуации со щелевыми солитонами в двухатомной ангармонической цепочке [6].

При изменении соотношения между массами (при $M < m$) уравнения (6) сохраняют свой вид, но частоты ω_1 и ω_2 меняются местами ($\omega_2 > \omega_1$), т.е. при изменении знака ε меняются местами f -поле и ϕ -поле ($f \leftrightarrow \phi, z \leftrightarrow -z$). В исходных переменных происходит сдвиг центра локализованной нелинейной стоячей волны на расстояние $3a/2$, где a — постоянная решетки.

Для случая верхней щели подстановка выражения (4) в уравнения (3) в случае $M > m$ также дает систему уравнений (6), но для несколько отличающихся от (5) по амплитуде переменных

$$f = 3\sqrt{A/m}(w - u)/2, \quad \phi = 3\sqrt{3A/m}(w + u)/2, \quad z = -(m/A\sqrt{3})x. \quad (10)$$

Следовательно, щелевые солитоны огибающей для верхней щели аналогичны солитонам нижней щели и отличаются от них лишь амплитудой и волновым числом, т.е. периодом быстрых пространственных осцилляций заполнения огибающей: в случае нижней щели соответствующие атомы в соседних элементарных ячейках колеблются практически в противофазе, а в случае верхней щели — практически в фазе. Как и в рассмотренном ранее случае нижней щели, теперь также f -поле и ϕ -поле в солитонном решении меняются местами ($f \leftrightarrow \phi, z \leftrightarrow -z$) при изменении знака величины $M - m$.

Интересно исследовать влияние на структуру и динамику щелевых солитонов дополнительного нелинейного внешнего потенциала для атомов цепочки (on-site potential). В случае двухатомной цепочки ангармонизмы во внешнем потенциале и в потенциале межчастичного взаимодействия приводят к различной структуре околощелевых солитонов и разной картине бифуркации решений при изменении частоты нелинейных возбуждений [4,5]. Учтем дополнительный ангармонический потенциал, действующий на атомы цепочки, в виде $U_1^n = C\gamma(u_n^4 + v_n^4 + w_n^4)/4$. При этом основная система уравнений практически сохраняет свой вид и сводится к (6), (7) простой заменой $\sqrt{1+\gamma}(f, \phi) \rightarrow (f', \phi')$.

Таким образом, мы показали, что в трехатомной цепочке, как и в двухатомной, существуют щелевые солитоны. Однако, обладая многими общими свойствами, солитоны в этих двух системах не являются идентичными и во многом отличаются.

В трехатомной цепочке существуют две щели в спектре линейных возбуждений, но щелевые солитоны вблизи двух щелей фактически идентичны и отличаются лишь периодом несущей волны. Структура солитонов также слабо зависит и от знака параметра $\varepsilon - (M/m) - 1$: при изменении этого знака происходит лишь пространственный сдвиг фазы несущей волны.

Однако существует ряд важных различий между щелевыми солитонами в двух- и трехатомной цепочках. В трехатомной цепочке в основном приближении структура солитона не зависит от типа ангармонизмов и при любом соотношении между межчастичным нелинейным взаимодействием и нелинейным внешним потенциалом идентична структуре Брэгговских солитонов в нелинейных модулированных оптических средах.

В трехатомной цепочке существует лишь одна бифуркация солитонного решения при частоте верхней границы щели (в случае «жесткой» нелинейности). Следовательно, в противоположность ситуации в двухатомной цепочке отсутствуют «темные» околосошелевые солитоны, симметричные по структуре относительно полей f и ϕ (см. [4]).

Наконец, в пределе однородной нелинейной цепочки в основном приближении отсутствуют специфические кинки сдвига фазы нелинейных волн с волновыми числами $k = \pi/3$ и $k = 2\pi/3$ в противоположность ситуации в середине зоны при $k = \pi/2$, где такие солитоны существуют.

Данная работа поддержана грантом N U21000 Международного научного фонда, грантом Американского физического общества и Государственным комитетом по науке и технике Украины в рамках проектов фундаментальных исследований N 2/142 «Дискретность» и N 68/12/94 «Кинк».

Список литературы

- [1] Mills D.L., Trullinger S.E. Phys. Rev. **B36**, 2, 947 (1987).
- [2] Coste J., Peyraud J. Phys. Rev. **B39**, 18, 13086; 13096 (1989).
- [3] Peyraud J., Coste J. Phys. Rev. **B40**, 18, 12201 (1989).
- [4] Chubykalo O., Kovalev A., Usatenko O. Phys. Rev. **B47**, 6, 3153 (1993).
- [5] Kivshar Yu.S. Phys. Lett. **A173**, 2, 172 (1992).
- [6] Chubykalo O., Kivshar Yu.S. Phys. Lett. **A178**, 1, 123 (1993).
- [7] Kohmoto M., Ono J. Phys. Lett. **A102**, 1, 145 (1984).
- [8] Ковалев А.С., Богдан М.М. Физика многочастичных систем. **13**, 20 (1988).