

УДК 539.21:678.01

© 1992

ВЫСШИЕ ПОРЯДКИ КONTИНУАЛЬНОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ ПРИ ОПИСАНИИ СВЕРХЗВУКОВЫХ АКУСТИЧЕСКИХ СОЛИТОНОВ БОЛЬШОЙ АМПЛИТУДЫ

С. А. Беклемшев, В. Л. Клочихин

Аналитически исследованы решения уравнения движения в виде уединенных волн в одномерной решетке с произвольными ангармоническими потенциалами межатомного взаимодействия, в том числе типа Морзе, Леннард—Джонса, Тоды и др. Рассмотрены высшие порядки континуального и квазиконтинуального приближения. Показана их сводимость друг к другу. Проведено сравнение различных приближенных решений с точным решением для решетки Тоды. Показано, что найденное в данной работе решение точнее полученных ранее. Справедливость данного решения для других межатомных потенциалов проверена с помощью расчета динамики на ЭВМ. Определены условия применимости континуальных приближений различного порядка, для них показана невозможность существования солитона растяжения в ангармонической цепочке с реалистическим потенциалом взаимодействия. В различных приближениях найдены зависимости амплитуды и ширины солитона от его скорости, а в случае действия внешней нагрузки найдена зависимость ширины солитона от равномерной статической деформации цепи.

Важной проблемой теоретической и прикладной физики является распространение нелинейных волн в квазидомерных идеальных периодических структурах [1, 2]. Распространение таких волн в ангармонических цепочках рассматривалось для простых межатомных потенциалов полиномиальной формы [3–10]. Динамика ангармонических кристаллов с реалистическими потенциалами типа Морзе и Леннард—Джонса изучалась главным образом численно [11–15], при этом анализировались как пологие, так и узкие солитоноподобные волны с большой амплитудой. Применяемое обычно при теоретическом анализе континуальное приближение [16] оправдано для пологих волн. Одной из центральных задач в теоретических исследованиях было расширение области аналитического рассмотрения на узкие высокоамплитудные солитоны и определение условий применения континуального приближения [15]. Существенные результаты получены в работах Коллинза [16–18] с помощью так называемого квазиконтинуального приближения.

Высшие порядки континуального приближения были затем рассмотрены также в работах [7, 19]. В данной работе мы покажем, что приближение [19] по точности эквивалентно подробно изученному первому квазиконтинуальному приближению [16–18].

В традиционном рассмотрении задачи о нелинейной динамике ангармонической цепочки [3–10] искомой функцией являются смещения атомов u_n из положения равновесия, удовлетворяющие уравнениям движения

$$m \ddot{u}_n = T_n - T_{n+1}, \quad (1)$$

где m — масса; T_{n+1} и T_n — силы, действующие на n -й атом со стороны соседних атомов. Удлинение n -й связи

$$R_n = u_n - u_{n-1}$$

представляется разложением в ряд

$$R_n = hu'_n - h^2 (u''_n/2) + h^3 (u'''_n/6) + \dots, \quad (2)$$

где h — равновесная длина связи (в общем случае в равномерно деформированной внешней нагрузкой цепочке), а производная берется по лагранжевой координате $x = nh$. Разложение (2) затем подставляют в (1) как аргумент функции $T_n = T(R_n)$, аппроксимируемой полиномом, и оставляют члены вплоть до заданной степени величины h . Чем выше степень величины h или соответствующая ей степень производной разложения (2), тем выше порядок континуального приближения.

При учете ангармонической поправки третьей и четвертой степени к потенциалу межатомного взаимодействия динамическая задача сводится к тем или иным формам уравнений Бусинеска [1, 15] или Кортевега-де Вриза (КдВ) [1, 10]. Влияние растягивающей нагрузки на распространение нелинейных волн в такой ангармонической цепочке исследовано в [6-9]. В работах [6, 7] потенциал межатомного взаимодействия аппроксимировался полиномом четвертой [6], а также пятой степени [7].

Иной подход к динамике нелинейной цепочки связан с переходом от уравнения (1) к дифференциальному уравнению непосредственно для величины $R_n = u_n - u_{n-1}$ [16-20]

$$m\dot{R}_n^2 = -(T_{n+1} + T_{n-1} - 2T_n). \quad (3)$$

Квазиконтинуальный подход [16-18], а также континуальное приближение [19] позволяют решать уравнения (3) для любых ангармонических потенциалов, включая реалистические потенциалы типа Морзе и Леннард—Джонса, а не только для их аппроксимаций в виде полиномов конечных степеней [3-10]. В квазиконтинуальном приближении, чтобы избежать аппроксимации производной потенциала (силы) полиномом, в уравнении движения (3) осуществлена операция обращения разностного оператора [18], действующего на производную потенциала T . Эта операция отличает квазиконтинуальный подход от континуального [19]. Развивая подход [19], мы покажем, что высшие порядки континуального и квазиконтинуального приближений сводятся друг к другу.

Переход к непрерывному пределу в (3) осуществляется с помощью разложения в ряд

$$T_{n\pm 1} = T_n \pm hT'_n + h^2 (T''_n/2) \pm h^3 (T'''_n/6) + \dots, \quad (4)$$

что дает уравнение движения

$$m\dot{R}^2 = -(h^2 T'' + h^4 (T^{(4)}/12) + h^6 (T^{(6)}/360) + \dots), \quad (5)$$

Одним из преимуществ данного уравнения является наличие в его правой части ряда по четным степеням, так что, ограничиваясь тремя первыми слагаемыми ряда в правой части уравнения (5), мы пренебрегаем уже 8-й производной величины T .

Будем искать решение уравнения динамики (5) для случая бегущих волн с переменной $x - Vt$, где V — фазовая скорость волны, t — время. Введем безразмерные величины: деформацию $r = R/h_0$, где h_0 — равновесная длина связи в недеформированной цепочке, и безразмерную силу $p(r) = T(r)/(kh_0)$, где $k = -T'(0)$ жесткость связи в недеформированной цепочке. Обозначим $v = (V/[C_0 \times (1 + r_{eq})])^2$, где $C_0 = h_0 (k/m)^{1/2}$ — скорость звука в недеформированной цепи;

r_{eq} — деформация, обусловленная постоянной внешней нагрузкой; $(1 + r_{eq}) = h/h_0$. Тогда уравнение бегущих волн запишется в виде

$$\nu r'' = - (p'' + h^2 (p^{(4)}/12) + h^4 (p^{(6)}/360) + \dots). \quad (6)$$

Из него следует также уравнение

$$\nu r^{(4)} = - (p^{(4)} + h^2 (p^{(6)}/12) + \dots). \quad (7)$$

Сила $p(r)$ и связанный с ней потенциал межатомного взаимодействия $U(r)$ могут быть совершенно произвольного типа. В данной работе будем рассматривать следующие потенциалы межатомного взаимодействия, приведенные с помощью деления на kh_0^2 к безразмерному виду:

потенциал Морзе

$$U(r) = (\exp(-2\alpha r) - 2 \exp(-\alpha r))/(2\alpha^2) - Fr, \quad (8)$$

где α — безразмерная постоянная,
потенциал Леннард—Джонса

$$U(r) = ((1+r)^{-12}/2 - (1+r)^{-6})/36 - Fr, \quad (9)$$

потенциал Тоды

$$U(r) = (\exp(-\theta r) + \theta r)/\theta^2, \quad (10)$$

где θ — безразмерная постоянная потенциала. В формулах (8), (9) величина F — (безразмерная) внешняя нагрузка, приложенная к концам цепи. Кроме того, мы рассмотрим цепочку с кубическим ангармонизмом

$$U(r) = r^2/2 - \gamma r^3/3, \quad (11)$$

где γ — безразмерная постоянная ангармонизма. Кубический потенциал качественно правильно передает разлетное состояние нагруженной цепочки.

Вычитая из (6) уравнение (7), умноженное на $h^2/12$, и опуская шестую и более высокие производные величины p в правой части уравнений (6) и (7), получим уравнение

$$p'' = -\nu [r'' - h^2 (r^{(4)}/12)]. \quad (12)$$

Оно совпадает с известным первым квазиконтинуальным приближением Коллинза [^{16, 18}], полученным им другим способом.

Если в уравнении (6) в правой части оставить два члена, то получим приближение, использованное в работе [¹⁹]

$$\nu r'' = - (p'' + h^2 p^{(4)}/12), \quad (13)$$

которое по точности эквивалентно (12). Первым слагаемым, которым мы пренебрегаем при получении уравнения (12), является величина $[(h^4/360) - (h^4/144)] p^{(6)} = -h^4 (p^{(6)}/240)$. При получении уравнения (13) пренебрегли величинами, начиная с $h^4 (p^{(6)}/360)$. Сравнивая эти две величины, а также почленно последующие отброшенные при получении уравнений (12) и (13) слагаемые, нетрудно увидеть, что они одного порядка по модулю и противоположны по знаку. Отсюда следует, что точное решение лежит, по-видимому, между этими двумя приближениями.

Из уравнений (6) и (7) можно получить более точное уравнение, вычитая из (6) уравнение (7), умноженное на $h^2/30$. При этом мы пренебрегаем слагаемыми с производными величины p восьмой и более высоких степеней, а слагаемые с шестой производной величины p взаимоуничтожаются

$$h^2 (p^{(4)}/20) + p'' = -\nu [r'' - h^2 (r^{(4)}/30)]. \quad (14)$$

Данное уравнение аналогично полученному во втором квазиконтинуальном приближении в работе [17], где для циклических граничных условий приводятся графические результаты численных расчетов решения (14). В настоящей работе предлагаются аналитические решения уравнений (12)—(14) и их сравнение с точным решением.

Дважды проинтегрировав (12), (13) и (14), получим

$$y'' = - [p + \nu (r - r_{eq})], \quad (15)$$

$$y = \begin{cases} -h^2 \nu r / 12, & \text{(а)} \\ h^2 p / 12, & \text{(б)} \\ h^2 (3p/5 - 2\nu r/5) / 12, & \text{(в)} \end{cases}$$

где (а), (б), (в) соответствуют приближениям (12), (13) и (14); r_{eq} — деформация статически растянутой или сжатой постоянной внешней нагрузкой цепочки. Уравнение (15) аналогично уравнению Ньютона для частицы с координатой y . Для такой частицы выполняется закон сохранения энергии $E = (y')^2/2 + \Pi(y) = \text{const}$, где первое слагаемое есть кинетическая, а второе — потенциальная энергия

$$\Pi(y) = \int (p + \nu (r - r_{eq})) dy. \quad (16)$$

Точки равновесия частицы, являющиеся экстремумами эффективного потенциала $\Pi(y)$, определяются из условия (рис. 1)

$$p(r) = -\nu (r - r_{eq}). \quad (17)$$

Первая точка равновесия $r = r_{eq}$ (рис. 1) отвечает равновесной конфигурации цепочки при действии внешней нагрузки F . Это максимум эффективного потенциала. Другая точка равновесия r_{\min} — минимум эффективного потенциала $\Pi(y)$.

Выразив переменную y через r и подставив в (15), после интегрирования получим уравнение фазовых траекторий

$$(r')^2/2 = \Phi(r), \quad \Phi(r) = (E - \Pi(r))/\mu(r), \quad (18)$$

где E — константа интегрирования, $\mu(r) = (dy/dr)^2$. В работе [7] вводилось понятие «эффективной массы» $\mu(r)$, но ее влияние на динамику не анализировалось.

Уравнение (18) позволяет определить профиль бегущей волны $r(x)$ через обратную функцию $x(r)$

$$x(r) = \int_r^{r_{\max}} dr [2\Phi(r)]^{-1/2}, \quad (19)$$

где r_{\max} — амплитуда уединенной волны. Потенциал $\Pi(r)$ для различных приближений есть

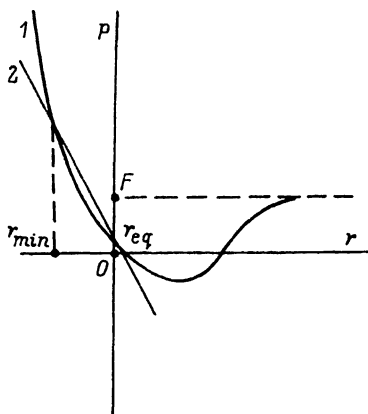


Рис. 1. Сила $p(r)$ межатомного взаимодействия в ангармонической цепочке, к концам которой приложена растягивающая нагрузка F (1), и график прямой (2) — $\nu(r - r_{eq})$, где r_{eq} — деформация статически растянутой нагрузкой F цепочки.

На пересечении кривой 1 и прямой 2 — точки r_{eq} максимума и r_{min} минимума эффективного потенциала.

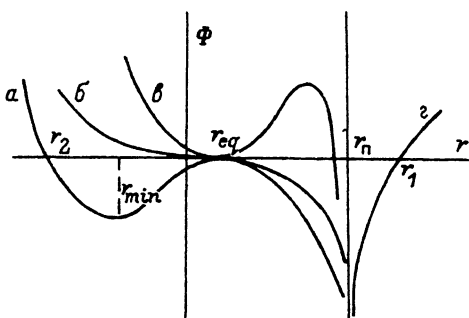


Рис. 2. Эффективный потенциал $\Phi(r)$ при $\nu > -p_r(r_{eq})$ (а), $\nu = -p_r(r_{eq})$ (б), $\nu < -p_r(r_{eq})$ (в). z — ветвь эффективного потенциала, возникающая в случае кубического ангармонизма.

$$\Pi(r) = \begin{cases} h^2 [\nu U - \nu^2 (r - r_{eq})^2] / 12, & (20a) \\ h^2 [\nu U + p^2/2 + \nu (r - r_{eq}) p] / 12, & (20б) \\ h^2 [\nu U + 3p^2/10 + 3\nu (r - r_{eq}) p/5 - \nu^2 (r - r_{eq})^2/5] / 12, & (20в) \end{cases}$$

где

$$p = (-dU/dr)/(kh_0).$$

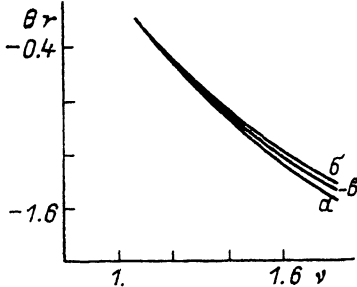
Для волн, бегущих со сверхзвуковыми, звуковыми и дозвуковыми скоростями, эффективный потенциал $\Phi(r)$ имеет вид, изображенный на рис. 2. Сверхзвуковой волне $\nu > -p_r(r_{eq})$, где $p_r = dp/dr$, отвечает солитон (рис. 2, а). Его профилю соответствует движение изображающей точки, стартовой из максимума потенциала — точки r_{eq} , затем отражающейся от левой стенки потенциала в области сжатия и возвращающейся обратно в точку r_{eq} . При $\nu \leq -p_r(r_{eq})$ (рис. 2, б, в) для реалистических потенциалов типа Морзе, Леннард—Джонса и т. п. такое движение невозможно. Константа интегрирования E определяется в случае солитона условием $E = \Pi(r_{eq})$.

Подставляя в выражение (20) равенство (17), легко убедиться, что потенциал $\Pi(r)$ в различных приближениях имеет одинаковые по величине экстремумы, а также приблизительно одинаково ведет себя вблизи них. Вблизи точки равновесия эффективного потенциала $r = r_{eq}$ и вблизи его минимума $r = r_{min}$ все три выражения (а), (б) и (в) переходят друг в друга. Поэтому сближение всех трех потенциалов (а), (б), (в) в значимой области r наступает, когда их максимумы и минимумы расположены близко друг к другу по r , т. е. в пределе не слишком быстрых волн, не слишком большой амплитуды и достаточно пологих. Это случай, когда наклоны секущей $p = -\nu(r - r_{eq})$ и касательной к кривой $p(r)$ в точке r_{eq} близки (рис. 1) $\nu \rightarrow -p_r(r_{eq})$.

Критерием сходимости двух приближений между собой будем считать то, что разница величин амплитуды солитона в различных приближениях будет

рис. 3. Амплитуда солитона, умноженная на параметр потенциала Тоды ν в решетке Тоды в зависимости от квадрата безразмерной скорости волны ν в приближениях а, б и в.

Точные значения амплитуды совпали с приближением в.



много меньше ее самой. Амплитуда солитона определяется уравнением фазовых траекторий (18) как координата r_{\max} поворота изображающей точки, откуда можно найти, что амплитуды, найденные в приближениях (а) и (б) формулы (20), сходятся

друг с другом при условии

$$|1 + p(r_{\max})/(\nu(r_{\max} - r_{eq}))| \ll 1. \quad (21)$$

Сходимость каждого из этих приближений со вторым континуальным приближением (в) определяется условием

$$|1 + p(r_{\max})/[\nu(r_{\max} - r_{eq})]| \ll \sqrt{5/3}. \quad (22)$$

Допустимость применения различных приближений (20) может быть проверена при сравнении с хорошо известным точным решением Тоды [1, 2]. Характерные величины амплитуд солитона в цепочке Тоды, умноженных на параметр потенциала Тоды, были определены для различных приближений (20) и сравниваются с известной амплитудой точного решения Тоды [1, 2] на рис. 3. На этом рисунке показано, что второе континуальное приближение (в) в области значений величины ν , в которой солитон имеет реалистичную ширину не менее нескольких межатомных промежутков, в масштабе рисунка совпадает с точным решением Тоды.

Точное решение расположено между приближенными решениями (а) Коллинза и (б) [19]. Таким образом, можно заключить, что приближения (в) практически точно описывает узкие солитоны большой амплитуды.

В работе [19], выполненной в первом континуальном приближении (13), получено, что зависимость $\mu(r) = (h^2 p_r / 12)^2$ приводит к появлению полюса в $\Phi(r)$, так как в точке перегиба межатомного потенциала $\mu(r) = 0$. Полюс в области растягивающих напряжений не оказывает влияния на наличие солитона сжатия, но возникает вопрос, не приводит ли он к возможности появления солитона растяжения в закритической области (рис. 2, з).

В работе [19] показано, что для потенциала Морзе (8) в первом континуальном приближении солитон растяжения невозможен. В первом квазиконтинуальном приближении Коллинза (12) эффективная масса $\mu(r) = (-h^2 \nu / 12)^2$ от величины r не зависит и вопроса о полюсе $\Phi(r)$ не возникает. Теперь посмотрим, как обстоит дело для более точного приближения (14). В этом случае эффективная масса $\mu(r) = [h^2(3p_r - 2\nu)/60]^2$ принимает нулевое значение при $p_r = 2\nu/3$. Исходя из того, что существуют лишь сверхзвуковые солитоны, находим, что полюс эффективного потенциала появляется только в случае $p_r > 2/3$.

Однако, как нетрудно получить, для реалистических потенциалов эта величина значительно меньше. Для потенциала Морзе (8) максимальное значение этой величины составляет $p_r = 1/8$, а для потенциала Леннард—Джонса (9) $p_r \ll 0.104$.

Таким образом, для ангармонических потенциалов Морзе и Леннард—Джонса полюс эффективного потенциала $\Phi(r)$ отсутствует. В области растяжения $r > r_{eq}$ этот потенциал монотонно убывает и появление солитона растяжения невозможно.

В случае кубического ангармонизма величина $p_r > 2/3$ при $r > 5/6\nu$. Поэтому полюс эффективного потенциала $\Phi(r)$ есть (рис. 2, з) при $r_n = (2\nu + 3)/(6\nu)$.

Предполагаемая уединенная волна растяжения существует лишь тогда, когда число связей, деформированных больше величины r_n , превышает единицу.

В противном случае такого солитона реально не существует. Чтобы оценить число связей L уединенной волны растяжения с деформациями $r > r_n$, используем формулу (19), где интеграл берется в пределах от величины $r = r_n$ до $r_{\max} = r_1$. Искомое число связей для кубического потенциала есть

$$L = \int_{r_n}^{r_1} (r - r_n) dr / [-5r^2 (r - r_1) (r - r_2)]^{1/2}, \quad (23)$$

где $r_{1,2} = [(3 - 4\nu/3) \pm (70\nu^2/9 - 5\nu)^{1/2}] / (3\gamma)$ — амплитуды r_1 -солитона растяжения и r_2 -солитона сжатия. Выражение (23) фактически вычисляет интеграл корня от функции, обратной возрастающей ветви эффективного потенциала справа от полюса (рис. 2, з). Поэтому для оценки этого интеграла сверху можно ограничиться первым членом разложения эффективного потенциала в ряд вблизи точки r_1 , тем самым аппроксимируя эффективный потенциал в данной области прямой. Расчет приводит к выражению

$$L = \left[81 [2 (70\nu^2 - 45\nu)^{1/2} + 9 - 14\nu]^3 / \{20 (70\nu^2 - 45\nu)^{1/2} \times [9 - 4\nu + (70\nu^2 - 45\nu)^{1/2}]^4\} \right]^{1/2}, \quad (24)$$

из которого ясно, что число связей уединенной волны растяжения с деформациями $r > r_n$ всегда меньше единицы. Отсюда следует, что солитонов растяжения для кубического потенциала также не существует.

Амплитуда солитона сжатия r_2 в данном случае кубического ангармонизма определяется простым условием $\Pi(r_2) = 0$, откуда для различных приближений (20) получаем соответственно

$$r_2 = \begin{cases} -3(\nu - 1)/(2\gamma), & (25a) \\ \{1 - 2(\nu - 1) - [1 + 4(\nu - 1)^2 + 5(\nu - 1)]^{1/2}\} / (3\gamma), & (25b) \\ [1 - 4\nu/9 - (70\nu^2 - 45\nu)^{1/2}/9] / \gamma. & (25в) \end{cases}$$

Из рис. 4 видно, что более точное решение (в) лежит между решениями (а) и (б), полученными соответственно в работе Коллинза [18] и нашей [19]. При $\nu \rightarrow 1$ все они совпадают.

Уравнение (19) позволяет оценить ширину L солитона на его полувысоте в соответствии с тремя рассматриваемыми приближениями

$$L = \begin{cases} \pi \left[-\nu / \{12 [p_r(r_{\min}) + \nu]\} \right]^{1/2}, & (26a) \\ \pi \left[p_r(r_{\min}) / \{12 [p_r(r_{\min}) + \nu]\} \right]^{1/2}, & (26б) \\ \pi \left[[3p_r(r_{\min})/5 - 2\nu/5] / \{12 [p_r(r_{\min}) + \nu]\} \right]^{1/2}, & (26в) \end{cases}$$

где $p_r = dp/dr$, r_{\min} — точка минимума эффективного потенциала $\Phi(r)$, которая определяется нетривиальным решением ($r \neq r_{eq}$) уравнения (17). В случае кубического ангармонизма имеем соответственно

$$L = \left\{ \pi \left\{ [1 + 1/(\nu - 1)] / 12 \right\}^{1/2} \right. , \quad (27a)$$

$$L = \left\{ \pi \left\{ [2 + 1/(\nu - 1)] / 12 \right\}^{1/2} \right. , \quad (27б)$$

$$L = \left\{ \pi \left\{ [8/5 + 1/(\nu - 1)] / 12 \right\}^{1/2} \right. . \quad (27в)$$

Видно, что наиболее точная зависимость (в) также лежит между двумя менее точными, а в пределе $\nu \rightarrow 1$ все зависимости совпадают (рис. 5).

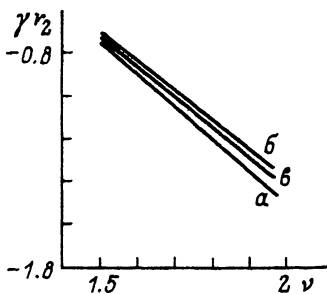


Рис. 4. Амплитуда солитона, умноженная на постоянную ангармонизма γ в цепочке с кубическим потенциалом межатомного взаимодействия в зависимости от квадрата безразмерной скорости волны ν в приближениях a , b и b .

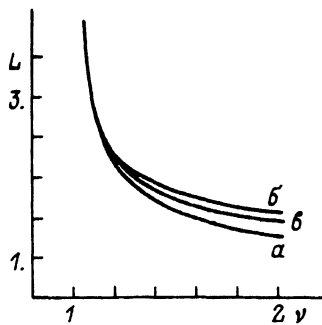


Рис. 5. Зависимость ширины солитона на полувысоте L от квадрата безразмерной фазовой скорости ν в цепочке с кубическим потенциалом межатомного взаимодействия в приближениях a , b и b .

Остановимся на влиянии равномерной статической деформации цепочки r_{eq} на параметры бегущего по ней солитона. Эта величина определяет положение минимума эффективного потенциала r_{min} , а также значения $\nu = V^2 / (C_0 (1 + r_{eq}))^2$.

Рассмотрим цепочку с кубическим ангармонизмом и приложенной постоянной внешней нагрузкой F . Сила взаимодействия атомов цепочки в таком случае примет вид $p(r) = \gamma r^2 - r + F$. Используя выражение (26), получим для ширины L солитона на полувысоте

$$L = \begin{cases} \pi (W/12)^{1/2}, & (28a) \\ \pi [(1 + W)/12]^{1/2}, & (28b) \\ \pi [(3/5 + W)/12]^{1/2}, & (28b) \end{cases}$$

$$W = (V^2/C^2) / [(V^2/C^2) - 1],$$

где C — скорость звука в деформированной цепочке

$$C^2 = C_0^2 (1 + r_{eq})^2 (1 - 2\gamma r_{eq}). \quad (29)$$

Она изменяется в области допустимых значений деформации от $r_{eq} = -1$ до $1/(2\gamma)$. При деформации $r_{eq} = (1 - \gamma)/(3\gamma)$ скорость звука имеет максимальное значение $C_{max} = C_0 (2\gamma/3 + 1/3)^{3/2}/\gamma$.

Нетрудно видеть, что ширина солитона растет при $V \rightarrow C$ по «релятивистскому закону» во всех трех приближениях. Влияние на ширину солитона внешней нагрузки целиком определяется зависимостью скорости звука от деформации всей цепочки (29).

Для того чтобы убедиться, что профиль уединенной волны, соответствующий выражению (18), найденный с использованием второго континуального приближения, устойчиво распространяется по цепочке атомов и отвечает свойствам солитона, мы использовали расчетную схему, аналогичную приведенной в работе [20]. Применялись безразмерная система единиц, описанная выше, и безразмерное время $t = C_0/h$. Рассматривалась цепочка с кубическим ангармонизмом. Профиль солитона был найден в соответствии с выражением (18). Использовались значения параметров: $\gamma = 1$, $\nu = 1.4$. Шаг интегрирования $10^{-3}t$ обеспечивал сохранение полной энергии цепочки с точностью до $10^{-2}\%$ в каждый момент времени. Рассчитанный профиль устойчиво пробежал цепочку из 112 атомов.

Таким образом, приближение (14), объединяющее квазиконтинуальный и континуальный подходы в высших порядках этих приближений, дало практически точное решение для солитонов. Оно позволило вычислить профиль уединенной волны и оценить ее основные параметры: амплитуду и ширину в зависимости от ее скорости, а также от равномерной статической деформации одномерного кристалла. Параметры, вычисленные в различных приближениях, позволили определить критерии применимости континуальных приближений различной точности.

Список литературы

- [1] Давыдов А. С. Солитоны в молекулярных системах. Киев: Наукова думка, 1984. 288 с.
- [2] Солитоны / Под ред. Р. Буллаф, Ф. Кодри. М.: Мир, 1983. 408 с.
- [3] Fermi E., Pasta J., Ulam S. // *Collected Papers of Enrico Fermi* (Chicago: University of Chicago Press). 1965. Paper 226. P. 978—988.
- [4] Zabusky N. J. // *Comput. Phys. Commun.* 1973. V. 5. P. 1—10.
- [5] Flytzanis N., Pnevmatikos St., Remoissenet M. // *Physica*. 1987. V. 26D. P. 311—320.
- [6] Мелькер А. И., Иванов А. В. // *ФТТ*. 1986. Т. 28. № 11. С. 3396—3402.
- [7] Мелькер А. И. // *ФТТ*. 1988. Т. 30. № 11. С. 3407—3412.
- [8] Сабиров Р. Х. // *ФТТ*. 1984. Т. 26. № 5. С. 1358—1361.
- [9] Сабиров Р. Х. // *ФТТ*. 1989. Т. 31. № 4. С. 167—171.
- [10] Wadati M. // *Phys. Soc. Jap.* 1975. V. 38. P. 673—680.
- [11] Rolf T. J., Rice S. A., Dancz J. // *J. Chem. Phys.* 1970. V. 70. P. 26—33.
- [12] Ali M. K., Somorjai R. L. // *J. Phys. A: Math. Gen.* 1979. V. 12. P. 2291—2303.
- [13] Valkering T. P., de Lang C. // *J. Phys. A: Math. Gen.* 1980. V. 13. P. 1607—1621.
- [14] Михайлин А. И., Слуцкер И. А. // *ФТТ*. 1989. Т. 31. № 2. С. 80—86.
- [15] Flytzanis N., Pnevmatikos St., Peyrard M. // *J. Phys. A: Math. Gen.* 1989. V. 22. P. 783—801.
- [16] Collins Michael A. // *Chem. Phys. Letters*. 1981. V. 77. N 2. P. 342—347.
- [17] Collins Michael A., Rice Stuart A. // *J. Chem. Phys.* 1982. V. 77. N 5. P. 2607—2622.
- [18] Collins Michael A. // *Adv. in Chem. Phys.* 1983. V. 53. P. 225—341.
- [19] Беклемишев С. А., Ключихин В. Л. // *ФТТ*. 1990. Т. 32. № 9. С. 2728—2733.
- [20] Toda morikazi // *Ark. fys. semin. Trondheim*. 1974. N 2. 196 p.
- [21] Gibson J. B., Goland A. N., Milgram M. and Vinyard G. H. // *Phys. Rev.* 1960. V. 120. N 4. P. 1229—1253.

Научно-исследовательский
физико-химический институт им. Л. Я. Карпова
Москва

Поступило в Редакцию
7 февраля 1992 г.
В окончательной редакции
8 мая 1992 г.