УДК 538.9

СОЛИТОНЫ В НАГРУЖЕННОЙ АТОМНОЙ ЦЕПОЧКЕ С КУБИЧЕСКИМ И КВАРТЕТНЫМ АНГАРМОНИЗМОМ

Р. Х. Сабиров

Рассмотрено распространение солитонов в одномерном кристалле с кубическим и квартетным ангармонизмом при наличии внешней растягивающей силы. Исследовано влияние внешней силы на параметры солитонов. Показано, что свойства солитонных решений существенно зависят от величины приложенной силы.

1. Вадати [1] рассмотрел распространение нелинейных волн в атомной цепочке с кубическим и квартетным ангармонизмом. В континуальном приближении он показал, что в такой решетке могут существовать солитоны и кноидальные волны. Представляет интерес аналогичная задача с учетом действия на цепочку постоянной растягивающей внешней силы. Дело в том, что одномерная атомная цепочка является классической моделью для исследования динамических свойств твердых тел и процесса их разрушения. Как показывают аналитические расчеты [2-5] и эксперименты по машинному моделированию [6-11], динамические эффекты существенны в термофлуктуационном разрушении твердых тел. Моделирование на ЭВМ методом молекулярной динамики разрушения одномерного кристалла показало [7], что оно происходит через образование нелинейных возбуждений, названных разрывными флуктуациями. В [11] обнаружено, что половина введенной за счет нагрузки в цепочку энергии идет на излучение солитонов, сопровождающее процесс разрыва межатомной связи.

Естественно, что распространение нелинейных волн в нагруженных решетках может иметь особенности по сравнению с их распространением в кристаллах, не подверженных нагрузке. Выяснение этих особенностей является необходимым шагом и для корректного в дальнейшем включения таких волн в процесс разрушения твердых тел.

2. При действии на цепочку внешней растягивающей силы F потенциальная энергия атомов в приближении взаимодействия ближайших соседей имеет вид

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

где R_n — координата n-го атома. Разложим межатомную потенциальную энергию $\varphi(R_{n,n-1})$ в ряд Тейлора вблизи равновесного межатомного расстояния a при $F=0$, ограничиваясь учетом кубичного и квартетного ангармонизма

$$\varphi(R_{n,\, n-1}) = \varphi(a) + \alpha (R_{n,\, n-1} - a)^2 - \beta (R_{n,\, n-1} - a)^3 + \gamma (R_{n,\, n-1} - a)^4, \tag{2}$$
$$\alpha = \frac{1}{2!}\varphi''(a), \quad \beta = -\frac{1}{3!}\varphi'''(a), \quad \gamma = \frac{1}{4!}\varphi^{IV}(a).$$

Следуя работе [12], можно показать, что

$$\varphi(R_{n,\, n-1}) - F R_{n,\, n-1} = -\varphi_0(a_0) + k_2 (R_{n,\, n-1} - a - a_0)^2 + k_3 (R_{n,\, n-1} - a - a_0)^3 + \gamma (R_{n,\, n-1} - a - a_0)^4, \tag{3}$$

где

$$\varphi_0(a_0) = -\varphi(a) + Fa + k_2 a_0^2 - k_3 a_0^3 + \gamma a_0^4,\quad 4\gamma a_0^3 - 3\beta a_0^2 + 2\alpha a_0 - F = 0,$$
$$k_2 = \alpha - 3\beta a_0 + 6\gamma a_0^2,\quad k_3 = -\beta + 4\gamma a_0. \tag{4}$$

Соотношения (4) определяют перенормировку за счет силы F констант потенциала α, β и расстояния a. За a_0 выбирается такое вещественное решение, которое при $F=0$ переходит в нуль. Его отсутствие означает, что при данной силе F система теряет устойчивость.

Введем в расчет смещения атомов u_n из их положений равновесия

$$R_{n,\ n-1} = a + a_0 + u_n - u_{n-1}. \tag{5}$$

Тогда потенциальную энергию атомов можно представить в виде

$$U = \sum_{n=1}^{N} [k_2 (u_n - u_{n-1})^2 + k_3 (u_n - u_{n-1})^3 + \gamma (u_n - u_{n-1})^4]. \tag{6}$$

Таким образом, обсуждаемая задача в математическом плане свелась к задаче о распространении нелинейных волн в свободной решетке, ранее исследованной в [1]. Влияние же силы F учитывается зависимостью коэффициентов k_2 и k_3 (4) от F.

3. Принимая во внимание результаты работы [1], для решения типа солитонов имеем (считаем α, $\gamma > 0$)

$$Z = -2C\left\{(-|B| + \sqrt{B^2+4AC})\,\mathrm{Sh}^2[(\sqrt{C}/2)(x+x_0)] + (|B| + \sqrt{B^2+4AC})\,\mathrm{Ch}^2 \times \right.$$
$$\left. \times [(\sqrt{C}/2)(x+x_0)]\right\}^{-1} \tag{7}$$

при $0 > Z > Z_2$ и

$$Z = 2C\left\{(|B| + \sqrt{B^2+4AC})\,\mathrm{Sh}^2[(\sqrt{C}/2)(x+x_0)] + (-|B| + \sqrt{B^2+4AC})\,\mathrm{Ch}^2 \times \right.$$
$$\left. \times [(\sqrt{C}/2)(x+x_0)]\right\}^{-1} \tag{8}$$

при $Z_1 > Z > 0$, где

$$A = 12\frac{\gamma}{k_2},\quad B = 12\frac{k_3}{k_2 l},\quad C = \frac{12}{l^2}\left(\frac{V^2}{v^2} - 1\right),\quad l = a + a_0,$$

$$Z_1 = (1/2A)(|B| + \sqrt{B^2+4AC}),\quad Z_2 = (1/2A)(|B| - \sqrt{B^2+4AC}), \tag{9}$$

V — скорость солитона, $v=\sqrt{2k_2/ml}$ — скорость звука в нагруженной решетке, m — масса атома. Решения (7), (8) записаны для $B \leqslant 0$. При замене перед фигурными скобками в (7) и (8) знаков на противоположные получаем решения соответственно для областей $-Z_2 > Z > 0$ и $0 > Z > -Z_1$ при $B \geqslant 0$. Важно подчеркнуть, что солитонные решения реализуются лишь при сверхзвуковых скоростях $V > v$ $(C > 0)$. Отметим, что v меньше скорости звука, относящейся ненагруженной решетке.

По смыслу величина $Z(x)$, где под x следует понимать $x - Vt$, описывает локальную деформацию атомной цепочки ($Z = u'_x$, u — функция смещения равновесных положений атомов). Решение (7) соответствует локальному сжатию, а (8) — растяжению цепочки (при $B > 0$ картина противоположная). Таким образом, в общем случае независимо от знака B, определяемого знаком k_3 (4), в цепочке могут распространяться солитоны сжатия и растяжения. Выражения (4), (7)—(9) полностью решают задачу о влиянии силы F на свойства солитонов.

4. Вначале исследуем простой случай $\gamma=0$, когда весь ангармонизм кубичен. Вычисление величин k_2, k_3 и a_0 из (4) здесь тривиально. Тогда из (7)—(9) имеем

$$Z = \frac{C}{B}\,\mathrm{Ch}^{-2}\left[\frac{\sqrt{C}}{2}(x+x_0)\right],\quad B = -12\frac{\beta}{\alpha l}\left(1 - \frac{F}{F_{\text{пр}}}\right)^{-1/2},\quad F_{\text{пр}} = \frac{\alpha^2}{3\beta} \tag{10}$$

для любого знака B (знак β до сих пор произволен). При $\beta > 0$ величина $F_{\text{пр}}$ определяет силу, при которой имеет место чисто механическое разрушение цепочки с кубическим ангармонизмом. Солитону вида Z (10) соответствует [1, 13, 14] ступенчатый переход от значения смещений атомов $u_0=-4\sqrt{C}/B$ при $x=-\infty$ до нулевого значения при $x=\infty$, перемещающийся вдоль оси x со скоростью V. Ширина солитона Δx и его амплитуда Z_0 равны

$$\Delta x=\frac{4\pi}{\sqrt{C}}=\frac{4\pi\alpha l}{3\beta u_0}\left(1-\frac{F}{F_{\text{пр}}}\right)^{1/2},\quad Z_0=\frac{C}{B}=$$
$$=-\frac{3}{4}\frac{\beta u_0^2}{\alpha l}\left(1-\frac{F}{F_{\text{пр}}}\right)^{-1/2}. \qquad (11),\ (12)$$

Знак Z_0 определяет тип солитона сжатия или растяжения (одновременное их существование в решетке здесь невозможно) в зависимости от знака β. Скорость V зависит от силы F и амплитуды ступенчатого возмущения u_0

$$\left(\frac{V^2}{v^2}-1\right)^{1/2}=\frac{\sqrt{3}\,\beta}{2\alpha}u_0\left(1-\frac{F}{F_{\text{пр}}}\right)^{-1/2}, \qquad (13)$$

причем

$$v^2=2\,(\alpha l^2/m)\,(1-F/F_{\text{пр}})^{1/2}. \qquad (14)$$

Как видно из (13), при фиксированном u_0 скорость солитона V с увеличением F растет для солитонов сжатия ($\beta>0$) и падает для солитонов растяжения ($\beta<0$). При этом у солитона сжатия увеличивается амплитуда и уменьшается ширина, т. е. он становится более ярко выраженным, как бы «стабилизируется» внешней силой. Обратная тенденция наблюдается для солитонов растяжения.

Принятое нами континуальное приближение применимо лишь при условии $\Delta x>l$ или с учетом (11) при

$$(1-F/F_{\text{пр}})^{1/2}>3\beta u_0/4\pi\alpha. \qquad (15)$$

Это неравенство ограничивает допустимые значения u_0 и, следовательно, допустимые значения V. Следуя [14] и учитывая (13), для энергии солитона можно получить

$$E=\frac{1}{3}\beta u_0^3\left[1+\frac{27}{40}\frac{\beta^2u_0^2}{\alpha^2}\left(1-\frac{F}{F_{\text{пр}}}\right)^{-1}\right]. \qquad (16)$$

Из-за силы F энергия солитона сжатия увеличивается, а растяжения — уменьшается. При этом всегда $E\leqslant(2\pi^2/5)\beta u_0^3$.

Любопытная ситуация, как следует из (4), реализуется при

$$\beta=4a_0\gamma,\quad k_2=\alpha-3/2\beta a_0,\quad a_0=(\alpha/2\beta)\left(1-\sqrt{1-(2\beta/\alpha^2)\,F}\right), \qquad (17)$$

когда $k_3=0$. Этот случай моделирует цепочку атомов как бы с чисто квартетным ангармонизмом даже при $\beta\neq0$, что видно из (6). Однако при фиксированных α, β, γ такая ситуация возможна, как следует из (17), лишь для вполне определенной величины F. Из (7)—(9) здесь имеем

$$Z=\mp\sqrt{C/A}\,\mathrm{Sech}\left(\sqrt{C}\,(x+x_0)\right), \qquad (18)$$

где знаки «—», «+» соответствуют солитону растяжения или сжатия. Оба типа солитонов обладают равными амплитудами, ширинами, скоростями и энергиями.

Интересна ситуация и при таких α, β, γ, F, при которых k_2 близко к нулю. Как следует из (4), $k_2=0$, если

$$6\gamma a_0^2-3\beta a_0+\alpha=0,\quad 3\beta a_0^2-4\alpha a_0+3F=0. \qquad (19)$$

Эти выражения при фиксированных α, β, γ можно рассматривать как уравнения относительно a_0 и F. При $k_2\to0$ величины A и B (9) стремятся к бесконечности, но их отношение не зависит от k_2 и конечно. При $k_2 \to 0$ из (7)—(9) имеем

$$Z = -C\left[\frac{AC}{|B|}\operatorname{Sh}^2\left(\frac{\sqrt{C}}{2}(x+x_0)\right)+\left(|B|+\frac{AC}{|B|}\right)\operatorname{Ch}^2\left(\frac{\sqrt{C}}{2}(x+x_0)\right)\right]^{-1} \qquad (20)$$

при $0 > Z > -C/|B|$ и

$$Z = C\left[\left(|B|+\frac{AC}{|B|}\right)\operatorname{Sh}^2\left(\frac{\sqrt{C}}{2}(x+x_0)\right)+\frac{AC}{|B|}\operatorname{Ch}^2\left(\frac{\sqrt{C}}{2}(x+x_0)\right)\right]^{-1} \qquad (21)$$

при $(|B|/A+C/|B|) > Z > 0$. Эти выражения записаны для случая $k_3 = -\beta + 4\gamma a_0 < 0$. Из (20), (21) видно, что в решетке реализуются фактически лишь солитоны растяжения с амплитудой $|B|/A$ и отсутствуют солитоны сжатия. В случае $k_3 > 0$ наблюдается обратная картина.

5. Формулы (4), (7)—(8) позволяют в общем случае провести анализ влияния силы F на свойства солитонов. Однако такое рассмотрение возможно лишь численно при заданных значениях α, β, γ. Тем не менее общая картина ясна и из качественного анализа отмеченных формул. Для примера обсудим случай $\beta > 0$.

При $F=0$, когда и $a_0=0$, следует ожидать в решетке наличия «малых» солитонов сжатия и «больших» — растяжения. Действительно, как видно из (9), $|Z_1| > |Z_2|$. С ростом F растет и a_0, в силу чего k_3 и $B \to 0$ со стороны отрицательных значений. Это приводит к выравниванию солитонов обоих типов, которые при $k_3=0$ имеют одинаковые параметры. При дальнейшем увеличении F величина k_3 (4) может стать положительной. Тогда в решетке будут реализовываться «малые» солитоны растяжения и «большие» — сжатия. Таким образом, как показывают точный анализ частных случаев и общее качественное рассмотрение, свойства солитонов в нагруженной решетке существенно зависят от величины нагрузки. Так, их амплитуды могут как увеличиваться, так и уменьшаться с изменением силы F. Какой тип солитонов доминирует в решетке, более ярко выражен, зависит как от параметров межатомного потенциала, так и силы F. Отметим, что на основе (4), (6) и результатов работы [1] можно провести анализ влияния внешней нагрузки на распространение кноидальных волн.

В [15] сделана попытка отождествления дилатонов — основного объекта дилатонной модели разрушения с солитонами и кноидальными волнами. Такой подход представляется ошибочным, так как по существу, по определению, дилатоны — нестационарные, нестабильные образования с конечным временем жизни. Их образование носит случайный, флуктуационный характер. Солитоны же, напротив, — стабильные объекты. Вызывает возражение и другой аспект работы [15]. Рассматриваемая в ней цепочка с ангармонизмом 3-го и 4-го порядков вообще не может быть разрушена, что очевидно, если заметить, что с ростом расстояния между атомами их потенциальная энергия стремится к бесконечности. Поэтому говорить о дилатонах здесь вообще не имеет смысла. Отметим, что в [15] не выполняются и граничные условия для солитонных решений в том смысле, что при $x \to \pm\infty$ должно быть $Z=0$.

В заключение заметим, что влияние солитонов и других нелинейных волн на разрушение тел представляется неоднозначным. С одной стороны, они, по-видимому, должны увеличивать прочность, отбирая на себя часть энергии, которая могла бы пойти на разрыв межатомных связей. Но, с другой стороны, энергия солитона при его распаде за счет внешних воздействий может пойти на катастрофическое разрушение целой микрообласти твердого тела с образованием микротрещины. Эти вопросы требуют детального рассмотрения, но в любом случае в них следует ожидать проявления влияния внешней силы на свойства самих нелинейных волн.

Список литературы

[1] Wadati M. // J. Phys. Soc. Jap. 1975. V. 38. N 3. P. 673—680.
[2] Савин Е. С. // Автореф. канд. дис. Л., 1982.

[3] Гиляров В. Л., Пахомов А. Б. // ФТТ. 1981. Т. 23. № 6. С. 1569—1572.
[4] Гиляров В. Л., Петров В. А. // ФТТ. 1983. Т. 25. № 2. С. 472—477.
[5] Гиляров В. Л., Петров В. А., Сабиров Р. Х., Лукьяненко А. С. // ФТТ. 1986. Т. 28. № 5. С. 1332—1337.
[6] Разумовская И. В., Зайцев М. Г. // ФТТ. 1978. Т. 20. № 1. С. 248—250.
[7] Мелькер А. И., Михайлин А. И. // ФТТ. 1981. Т. 23. № 6. С. 1746—1750.
[8] Зайцев М. Г., Разумовская И. В. // ВМС. 1979. Т. 21Б. № 6. С. 461—463.
[9] Мелькер А. И., Кузнецова Т. Е. // ФТТ. 1977. Т. 19. № 8. С. 1531—1533.
[10] Мелькер А. И., Михайлин А. И. // ФТТ. 1984. Т. 26. № 4. С. 1236—1238.
[11] Лагунов В. А. // ФТТ. 1986. Т. 28. № 11. С. 3466—3472.
[12] Сабиров Р. Х. // ФТТ. 1984. Т. 26. № 5. С. 1358—1361.
[13] Косевич А. М. Основы механики кристаллической решетки. М.: Наука, 1972. С. 185.
[14] Давыдов А. С. Солитоны в молекулярных системах. Киев: Наукова думка, 1984. 288 с.
[15] Мелькер А. И., Иванов А. В. // ФТТ. 1986. Т. 28. № 11. С. 3396—3402.

Московский государственный
педагогический институт
им. В. И. Ленина

Поступило в Редакцию
1 июля 1988 г.
В окончательной редакции
22 ноября 1988 г.