

Дробные и расщепленные краудионы в сложных кристаллических структурах

В. Д. Нацик, С. Н. Смирнов

*Физико-технический институт низких температур им. Б. И. Веркина НАН Украины
пр. Ленина, 47, г. Харьков, 61164, Украина
E-mail: smirnov@ilt.kharkov.ua*

Е. И. Назаренко

Харьковский национальный университет им. В. Н. Каразина, пл. Свободы, 4, г. Харьков, 61077, Украина

Статья поступила в редакцию 6 октября 2000 г.

Проанализированы условия существования и особенности динамики краудионных возбуждений в кристаллах со сложной структурой кристаллического поля, формирующего краудионы в плотноупакованных атомных рядах. Кристаллическая матрица предполагается абсолютно жесткой, поэтому описание краудионов сводится к анализу обобщенной модели Френкеля—Конторовой и соответствующего ей нелинейного дифференциального уравнения Клейна—Гордона. В рамках этой модели изучены случаи так называемых двухъямного и двухбарьерного потенциалов кристаллического поля: описаны структура субкраудионов с дробными топологическими зарядами, расщепленных полных краудионов, а также асимптотический распад расщепленных краудионов на субкраудионы при трансформации двухбарьерного потенциала в двухъямный. Отдельно обсуждены условия существования специальных типов субкраудионов, связанные с атомной вязкостью кристалла и приложенной к нему внешней силой. Проведенный качественный анализ не предполагает точного решения в явном виде нелинейного уравнения Клейна—Гордона. Результаты этого анализа обобщают выводы, полученные ранее при изучении некоторых частных случаев точно решаемых уравнений Клейна—Гордона со сложными потенциалами. Результаты работы могут быть использованы не только в физике краудионов, но и в других разделах нелинейной физики, базирующихся на модели Френкеля—Конторовой.

Проаналізовано умови існування і особливості динаміки краудіонних збуджень у кристалах зі складною структурою кристалічного поля, котре формує краудіони у щільноупакованих атомних рядах. Кристалічна матриця вважається абсолютно жорсткою, тому опис краудіонів зводиться до аналізу узагальненої моделі Френкеля—Конторової і відповідного нелінійного диференціального рівняння Клейна—Гордона. В рамках цієї моделі вивчено випадки так званих двоямного та двобар'єрного потенціалів кристалічного поля: описано структуру субкраудіонів з дробними топологічними зарядами, розщеплених повних краудіонів, а також асимптотичний розпад розщеплених краудіонів на субкраудіони при трансформації двобар'єрного потенціалу в двоямний. Окремо обговорено умови існування спеціальних типів субкраудіонів, котрі пов'язані з атомною в'язкістю кристалу і прикладеними до нього зовнішніми силами. Проведений якісний аналіз не передбачає точного розв'язку у явному вигляді нелінійного рівняння Клейна—Гордона. Результати цього аналізу узагальнюють висновки, одержані раніше при вивченні деяких часткових випадків точного розв'язку рівняння Клейна—Гордона зі складними потенціалами. Результати роботи можуть бути використані не тільки у фізиці краудіонів, але і в інших розділах нелінійної фізики, котрі базуються на моделі Френкеля—Конторової.

PACS: 05.45.Yv, 61.72.Bb, 61.72.Ji, **61.80.-x**, **62.30.+d**, 66.30.Lw

Краудионы представляют собой нелинейные уединенные волны смещений, которые возникают в плотноупакованных атомных рядах, слабо связанных с окружающей эти ряды кристаллической матрицей [1–3]. Выделенный атомный ряд может являться как собственным внутренним фрагментом кристалла, так и цепочкой адсорбированных атомов, расположенной на его поверхности [4]. Есть основания полагать, что возбуждения краудионного типа играют важную роль также в динамике линейных ориентированных полимеров, в частности двойных полимерных цепей; в этом случае в качестве атомов следует рассматривать относительно жесткие мономеры, внутренними степенями свободы которых можно пренебречь [5,6].

Для качественного описания основных свойств краудионов в физике кристаллов широко используется модель одномерного кристалла Френкеля–Конторовой — цепочка сильно взаимодействующих между собой атомов, совершающих одномерное движение на неподвижной периодической подложке, которая создает относительно слабое потенциальное поле [3,7,8]. При сопоставлении этой модели с реальным кристаллом предполагается, что подвижная цепочка атомов соответствует выделенному атомному ряду, а периодический потенциал подложки моделирует взаимодействие этого ряда с кристаллической матрицей. В нашей недавно опубликованной работе [9] задача о структуре и движении краудиона рассмотрена как динамическая проблема сложной трехмерной кристаллической решетки. В этой работе сформулированы требования к параметрам межатомного взаимодействия и геометрическим параметрам кристалла, выполнение которых позволяет:

- выделить краудионные возбуждения на фоне малых упругих деформаций кристалла;
- свести описание краудионов к анализу уединенных волн в одномерном кристалле Френкеля–Конторовой;
- получить явные выражения, связывающие потенциал подложки и параметры модели Френкеля–Конторовой с потенциалами межатомного взаимодействия и другими микроскопическими характеристиками трехмерного кристалла.

В работе [9] также показано, что корректное разделение нелинейных краудионных возбуждений и линейных упругих деформаций в трехмерном кристалле возможно только в длинноволновом приближении. Этому приближению соответствуют краудионы, имеющие достаточно

большую ширину $\lambda \gg b$ и достаточно малую скорость $V \ll c$ (b и c — соответственно характерные значения межатомного расстояния и скорости звука в кристалле). Выполнение указанных выше требований позволяет в уравнениях, описывающих краудионы, перейти к континуальному пределу. В первом приближении можно также считать кристаллическую матрицу абсолютно жесткой, т.е. пренебречь ее деформациями. В этом случае для описания нелинейной динамики атомов выделенного ряда в качестве естественной полевой динамической переменной удобно использовать функцию $u(x, t)$ — поле продольных смещений атомов из положений равновесия в идеальном кристалле, которое зависит от координаты x вдоль цепочки и времени t . Предполагается, что направления оси x и смещения $u(x, t)$ задаются элементарным вектором трансляций кристалла \mathbf{b} вдоль рассматриваемой цепочки атомов (рис. 1). Функционал энергии, соответствующий этому приближению, имеет следующий вид:

$$H = \frac{1}{b^*} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{m_a}{2} (\dot{u})^2 + \frac{\omega}{2} (u')^2 + \Phi(u) - F(x, t)u \right] dx. \quad (1)$$

Здесь m_a и b^* — соответственно масса атомов выделенного ряда и равновесное расстояние между ними; $F(x, t)$ — действующая на эти атомы внешняя по отношению к кристаллической решетке сила; ω — параметр межатомного взаимодействия внутри выделенного ряда; $\Phi(u) = \Phi(u + b)$ — периодический потенциал кристаллического поля для атомов выделенного ряда (потенциал «подложки»); $\dot{u} = \partial u / \partial t$, $u' = \partial u / \partial x$.

Если взаимодействие двух атомов различных химических элементов α и α' , соединенных вектором \mathbf{r} , описывается парным потенциалом $U_{\alpha\alpha'}(\mathbf{r})$, то выражения для параметра ω и потенциала $\Phi(u)$ имеют вид [9]

$$\omega = \frac{1}{2} \sum_{\rho} \rho_i \rho_k \frac{\partial^2 U_{11}(\rho)}{\partial \rho_i \partial \rho_k}, \quad (2a)$$

$$\Phi(u) = \sum_{\alpha, \mathbf{R}^{(\alpha)}} [U_{1\alpha}(\mathbf{R}^{(\alpha)} - \tau u) - U_{1\alpha}(\mathbf{R}^{(\alpha)})], \quad (2b)$$

$$\tau = \frac{\mathbf{b}}{b}.$$

В этих выражениях атомам выделенного ряда приписан химический индекс $\alpha = 1$, а суммирование выполняется по равновесным положениям

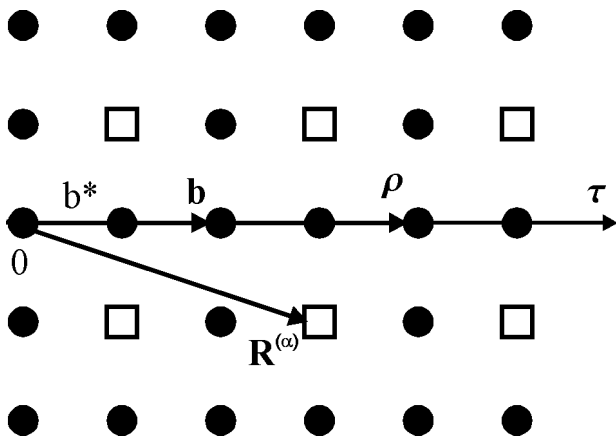


Рис. 1. Фрагмент сложной кристаллической решетки с выделенным атомным рядом (двухмерная схема): \mathbf{b} и $\boldsymbol{\tau}$ — соответственно элементарный вектор трансляции решетки и направляющий вектор вдоль выделенного ряда атомов; $\boldsymbol{\rho}$ и $\mathbf{R}^{(\alpha)}$ — соответственно равновесные положения атомов выделенного ряда и окружающей его кристаллической матрицы; b^* — равновесное расстояние между атомами выделенного ряда.

этих атомов $\boldsymbol{\rho}$ и атомов матрицы $\mathbf{R}^{(\alpha)}$ (рис. 1). Начало отсчета для векторов $\boldsymbol{\rho}$ и $\mathbf{R}^{(\alpha)}$ удобно выбрать на одном из атомов выделенного ряда, имеющем максимальную энергию связи с матрицей, что обеспечивает положительную определенность потенциала $\Phi(u) \geq 0$. В общем случае параметры b и b^* имеют различную величину, но в данной работе мы рассмотрим простой случай, когда $b = b^*$. В дальнейшем также удобно использовать систему физических единиц, в которой $m_a = 1$, $b = 1$ и $\omega = 1$, сохранив для безразмерных величин прежние обозначения. С учетом этих упрощений уравнение движения для поля смещений $u(x, t)$, соответствующее функционалу энергии (1), имеет вид

$$\ddot{u} - u'' + \frac{d}{du} \Phi(u) = F. \quad (3)$$

Это дифференциальное уравнение известно в математической физике как нелинейное уравнение Клейна — Гордона. Оно является основой не только теории краудионов, к такому уравнению приводит также анализ множества других физических задач [8,10–14].

С точки зрения физики нелинейных явлений, основной интерес представляют солитоноподобные решения уравнения (3), которые существуют, если потенциал $\Phi(u)$ имеет множество u_p точек абсолютного минимума: $\Phi(u_p) = 0$, где

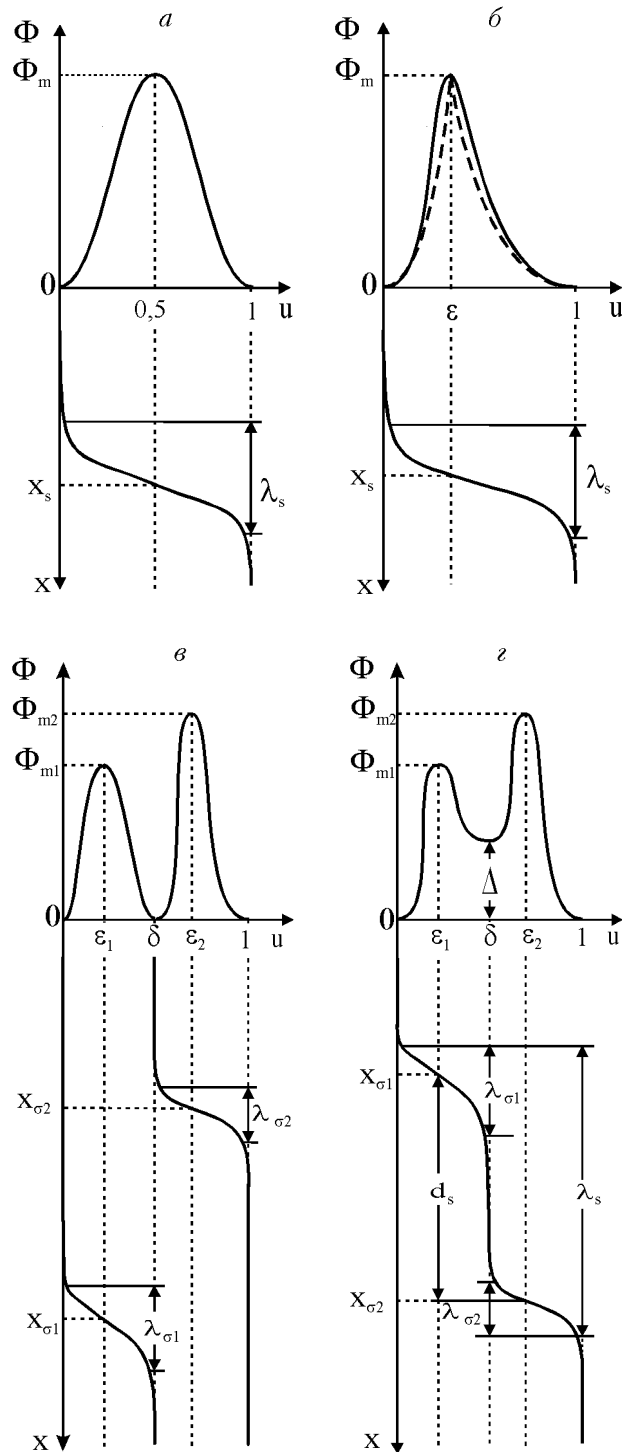


Рис. 2. Различные типы потенциалов кристаллического поля $\Phi(u)$ и соответствующие им кинки: a — однобарьерный симметричный потенциал; $б$ — однобарьерный асимметричный потенциал (сплошная линия) и его кусочно-непрерывная параболическая аппроксимация (пунктир); $в$ — двухъямный потенциал (и дробные кинки с центрами в точках $x_{\sigma i}$ и ширинами $\lambda_{\sigma i}$ ($i = 1, 2$)); $г$ — двухбарьерный потенциал и расщепленный кинк, состоящий из двух виртуальных субкинков с центрами в точках $x_{\sigma i}$ и ширинами $\lambda_{\sigma i}$; λ_s — ширина полного кинка; d_s — ширина дефекта упаковки.

$u_p = p = n + \delta_i$, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, $0 \leq \delta_i < 1$. Принятая здесь нумерация минимумов учитывает как наличие трансляционной симметрии кристалла, так и возможность существования в пределах периода трансляций $n \leq u < n + 1$ более чем одного абсолютного минимума: периоды трансляций пронумерованы числами натурального ряда n , а точки абсолютного минимума внутри отдельного периода — дробными числами $\delta_i = 0, \delta_1, \delta_2, \dots$. Устойчивые солитоноподобные решения уравнения (3) в отсутствие внешней силы ($F \equiv 0$) представляют собой уединенные волны стационарного профиля

$$u(x, t) = u_q(\xi), \quad \xi = x - V_q t, \quad (4)$$

которые движутся с постоянной скоростью V_q и удовлетворяют граничным условиям

$$u'_q(\pm\infty) = 0, \quad u_q(\infty) - u_q(-\infty) = \int_{-\infty}^{\infty} u'_q(\xi) d\xi = q. \quad (5)$$

Здесь q — положительное или отрицательное число, равное разности двух любых соседних чисел из набора $p = n + \delta_i$; это число получило название топологического заряда уединенной волны и является ее интегралом движения. При наличии у потенциала $\Phi(u)$ одного абсолютного минимума на периоде трансляций (рис. 2,а,б) набор чисел $p = n$ и топологический заряд может принимать два значения $q = s = \pm 1$, а соответствующие топологические солитоны называются полными (целочисленными). Солитоны, у которых $q = \sigma$, где $|\sigma| < 1$, возможны в случае так называемых многоямных потенциалов (рис. 2,в) и получили название субсолитонов (их также можно назвать дробными).

Отметим, что однородные решения уравнения (3) $u_p = p$ можно трактовать как многократно вырожденный физический вакуум для поля $u(x, t)$, тогда уединенная волна $u_q(x - V_q t)$ выступает как нелинейное возбуждение вакуума [14], она представляет собой движущуюся размытую границу с центром в точке $x_q = V_q t$ между двумя заданными на бесконечности однородными состояниями u_p и u_{p+q} .

Как уже отмечалось выше, функционал энергии (1) и уравнение движения (3) являются первым (основным) приближением при описании краудионов. В этом приближении атомная структура и динамические свойства краудионов определяются, в первую очередь, формой и параметрами потенциала $\Phi(u)$ *. В классической работе Френкеля—Конторовой и в существующей теории краудионов рассматривался простейший синусоидальный потенциал $\Phi(u) = \Phi_m \sin^2(\pi u)$. При таком потенциале кристаллического поля $p = n$ и $q = s = \pm 1$; при выполнении неравенства $\Phi_m \ll 1$ краудионное возбуждение имеет вид простого скопления (или разрежения) атомов в выделенном ряду, ширина которого порядка $\lambda_s = \sqrt{(1 - V_s^2)/2\Phi_m} \gg 1$, а на графике функции $u_s(x - V_s t)$ это возбуждение изображается единичным кинком с центром в точке $x_s = V_s t$ (рис. 2,а). Топологический заряд $s = -1$ соответствует делокализованному межузельному атому (краудиону), а $s = 1$ — делокализованной вакансии (антикраудиону).

За последние годы выполнена серия исследований, начатая работами [13,15,16], в которых анализировались изменения структуры и параметров солитонов и соответствующих им кинков в обобщенной модели Френкеля—Конторовой, обусловленные существенным отклонением формы потенциала $\Phi(u)$ от синусоиды (результаты этих исследований освещены в обзоре [8]). Наибольший интерес, с нашей точки зрения, представляют случаи многоямных (рис. 2,в) и многобарьерных (рис. 2,з) потенциалов $\Phi(u)$: многоямный потенциал допускает существование субкинков с дробным топологическим зарядом $q = \sigma$, где $|\sigma| < 1$ (например, $|\sigma| = \delta$, $1 - \delta < 1$); в случае многобарьерного потенциала полный кинк с целочисленным топологическим зарядом $q = s = \pm 1$ имеет внутреннюю «тонкую» структуру и может рассматриваться как расщепленный на однозначно связанные между собой фрагменты, похожие на субкинки.

В изученных ранее задачах нелинейной физики выводились (или выбирались как модельные) вполне конкретные двухъямные и двухбарьерные симметричные потенциалы $\Phi(u)$, переходящие при определенных значениях их параметров в синусоидальный потенциал и допускающие получение в явном виде точных решений уравнения

* Следующее приближение теории краудионов — учет упругой податливости и деформации кристаллической матрицы. Оно приводит к определенным перенормировкам характеристик краудиона, не изменяя качественных представлений о краудионном возбуждении [9].

Клейна—Гордона (3). Один из простейших конкретных примеров — функция $\Phi(u)$ вида [17,18]

$$\Phi(u) = \Phi_m [\sin^2(\pi u) + \gamma \sin^2(2\pi u)] . \quad (6)$$

При $\gamma = 0$ эта функция переходит в классический потенциал Френкеля—Конторовой, а при $\gamma > 1/4$ представляет собой симметричный двухбарьерный потенциал с промежуточным минимумом в точке $\delta = 1/2$. Функцию (6) можно формально трактовать как аппроксимацию более сложной периодической функции первыми членами ряда Фурье.

Однако при анализе краудионов в сложных кристаллических структурах, особенно в ориентированных полимерах, потенциал $\Phi(u)$ может оказаться весьма сложным и далеким от простой аппроксимации вида (6), поэтому использование таких аппроксимаций не позволяет описать многие интересные и важные свойства реальных краудионных возбуждений. Основной задачей данной работы является качественный анализ структуры и динамических свойств краудионов в случае многоямного и многобарьерного потенциалов кристаллического поля без конкретизации явного вида функции $\Phi(u)$ и без получения точных решений уравнения Клейна—Гордона (3) в явном виде. При этом уже известные положения о субкинках и расщеплении полных кинков будут сформулированы в более общем виде и применены для описания краудионов с учетом их специфики. Кроме того, будут также описаны некоторые новые свойства краудионов в сложных кристаллах. Результаты работы, естественно, могут быть использованы не только в теории краудионов, но и в других разделах физики нелинейных явлений, описание которых сводится к анализу решений нелинейного уравнения Клейна—Гордона. Некоторые из результатов нашего анализа с общезначимой точки зрения аналогичны выводам, полученным ранее в теории магнитных солитонов.

1. Полные и дробные краудионы

Обратимся вначале к описанию структуры и динамики краудионов, не конкретизируя точный вид потенциала $\Phi(u)$, но предполагая, что этот потенциал является периодическим и имеет набор точек абсолютного минимума $u_p = p = n + \delta_i$ ($\Phi(u_p) = 0$) и набор такого же числа точек максимумов различной высоты $u_m = m = n + \varepsilon_i$ ($\Phi(u_m) = \Phi_{mi}$), где $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, 0 \leq \delta_i, \varepsilon_i \leq 1$. В отсутствие внешней силы ($F \equiv 0$) первый и второй интегралы уравнения (3), которые опи-

сывают уединенные волны $u_q(x - V_q t)$, удовлетворяющие граничным условиям (5) с произвольным значением q , можно записать в следующем виде:

$$u'_q = \text{sgn}(q) \left(\frac{2\Phi(u_q)}{1 - V_q^2} \right)^{1/2}, \quad (7)$$

$$\int_{\varepsilon_i}^{u_{qi}} \frac{du}{\sqrt{2\Phi(u)}} = \text{sgn}(q_i) \frac{x - V_{qi}t}{\sqrt{1 - V_{qi}^2}}. \quad (8)$$

Выбор нижнего предела интегрирования ε_i в формуле (8) определяет центр краудиона (кинка) $x_{qi} = V_{qi}t$ как точку, в которой абсолютное значение краудионной деформации достигает максимальной величины:

$$\max |u'_{qi}| = \left(\frac{2\Phi_{mi}}{1 - V_{qi}^2} \right)^{1/2}. \quad (9)$$

Принятое нами определение центров краудионов и их нумерация адекватно отражают то обстоятельство, что отдельный тип краудиона однозначно связан с одним из максимумов потенциала $\Phi(u)$. Из формул (7) и (8) легко видеть, что детали внутренней структуры краудионного возбуждения (кинка) определяются формой потенциального профиля $\Phi(u)$ на интервале, соединяющем две соседние точки абсолютного минимума, этот интервал задает величину топологического заряда q_i . Сразу отметим, что применимость полученных выше формул для описания краудионных возбуждений в реальных кристаллах ограничивается требованием $\max |u'_{qi}| \ll 1$, оправдывающим использование континуального предела. Это требование, согласно (9), сводится к условию $1 - V_{qi}^2 \gg 2\Phi_{mi}$, которое нарушается, если скорость краудиона приближается к предельному значению $V = 1$ (в системе исходных единиц — к скорости $c = \sqrt{\omega/m_a}$) и анализ столь быстро возбуждения требует учета решеточных эффектов.

В качестве примера сначала рассмотрим одноямный симметричный потенциал с точкой максимума $\varepsilon = 1/2$ (рис. 2,а), допускающий в достаточно широких окрестностях точек минимума $|u| < u^*$ и максимума $|u - 1/2| < u^*$ квадратичные аппроксимации [3]:

$$\Phi(u) = \begin{cases} \frac{1}{2} \Phi''(0) u^2, & |u| < u^*, \\ \Phi_m + \frac{1}{2} \Phi''\left(\frac{1}{2}\right) \left(u - \frac{1}{2}\right)^2, & \left|u - \frac{1}{2}\right| < u^*. \end{cases} \quad (10)$$

Если не рассматривать «экзотические» потенциалы, то для параметра u^* , определяющего интервалы применимости аппроксимации (10), можно считать справедливой оценку $u^* \approx 1/4$. Данный потенциал допускает существование только полных краудионов с целым топологическим зарядом $q = s$. Используя (8) и (10), легко получить асимптотические формулы, описывающие структуру краудиона (форму кинка) вдали и вблизи от его центра $x_s = V_s t$ ($\xi = 0$):

$$u_s(\xi) = \begin{cases} 1 - u^* \exp\left(\frac{\lambda_c - s\xi}{\lambda_0}\right), & s\xi > \lambda_c; \\ \frac{1}{2} + \lambda_m^* \sin\left(\frac{s\xi}{\lambda_m}\right), & |\xi| < \lambda_c; \\ u^* \exp\left(\frac{\lambda_c + s\xi}{\lambda_0}\right), & s\xi < -\lambda_c. \end{cases} \quad (11)$$

Форма кинка характеризуется набором четырех параметров λ_0 , λ_m , λ_m^* и λ_c , имеющих размерность длины:

$$\lambda_0 = \left(\frac{1 - V_s^2}{\Phi''(0)}\right)^{1/2}, \quad \lambda_m = \left(\frac{1 - V_s^2}{|\Phi''(1/2)|}\right)^{1/2}, \quad (12)$$

$$\lambda_m^* = \left(\frac{2\Phi_m}{|\Phi''(1/2)|}\right)^{1/2}, \quad \lambda_c = \lambda_m \arcsin\left(\frac{1 - 2u^*}{2\lambda_m^*}\right).$$

Параметр λ_c определяет полуширину центральной части кинка, а λ_0 — протяженность его «крыльев», поэтому в качестве характерной ширины кинка λ_s следует рассматривать сумму:

$$\lambda_s = 2(\lambda_0 + \lambda_c) = 2\lambda_0 \left[1 + \frac{\lambda_m}{\lambda_0} \arcsin\left(\frac{1 - 2u^*}{2\lambda_m^*}\right) \right]. \quad (13)$$

Анализ показывает, что для широкого класса потенциалов $\Phi(u)$, удовлетворяющих условию применимости континуального приближения

$\max |u'_s| \ll 1$ (см. формулу (9)), но отличающихся кривизной в точках минимума и максимума, параметры λ_0 и λ_c имеют одинаковый порядок величины, существенно зависящий от высоты барьера Φ_m :

$$\lambda_c \sim \lambda_0 \approx \frac{\lambda_s}{4}, \quad \lambda_s = \left(\frac{1 - V_s^2}{2\Phi_m}\right)^{1/2}. \quad (14)$$

Для барьеров с «заостренной» вершиной ($u^* \rightarrow 0$, $|\Phi''(1/2)| \rightarrow \infty$) центральная часть кинка отсутствует и его ширина определяется в основном высотой барьера Φ_m и величиной производной $\Phi''(0)$. В тех случаях, когда $\Phi''(0) \rightarrow 0$ при сохранении конечной высоты барьера Φ_m , ширина кинка аномально увеличивается, а экспоненциальные асимптотики поля смещений $u_s(\xi)$ на больших расстояниях от центра кинка превращаются в степенные. Такие кинки изучались ранее [14] и получили название степенных или алгебраических.

Следует отметить специфику краудионных возбуждений в реальных трехмерных кристаллах: учет упругой податливости кристаллической матрицы приводит к появлению степенной асимптотики поля деформаций краудиона на больших расстояниях от его центра при любой форме потенциала $\Phi(u)$ [9,19–21]. Поэтому в случае краудиона в трехмерном кристалле параметр λ_s имеет смысл характерного размера его ядра.

Специальный интерес представляет случай асимметричного одноявного потенциала $\Phi(u)$ (рис. 2,б): такой потенциал возможен в кристаллах, не имеющих центра инверсии. В этом случае структура поля смещений полного краудиона (форма кинка) вблизи его центра является асимметричной. Выше мы видели, что величина производных от потенциала $\Phi(u)$ в окрестности точки максимума не оказывает существенного влияния на структуру краудиона, поэтому указанную асимметрию удобно проиллюстрировать, рассматривая в качестве аппроксимации потенциала, показанного на рис. 2,б, кусочно-непрерывную функцию*:

$$\Phi(u) = \begin{cases} \frac{\Phi_m}{\varepsilon^2} u^2, & 0 \leq u \leq \varepsilon, \\ \frac{\Phi_m}{(1 - \varepsilon)^2} (u - 1)^2, & \varepsilon \leq u \leq 1. \end{cases}$$

* Кусочно-параболическая аппроксимация потенциала $\Phi(u)$ часто используется при анализе топологических солитонов в различных физических моделях [12,14,22,23].

Эта аппроксимация позволяет получить точные выражения для поля смещений $u_s(\xi)$ в явном виде:

$$u_s(\xi) = \begin{cases} \varepsilon \exp\left(\frac{s\xi}{\lambda_\varepsilon}\right), & s\xi \leq 0, \\ 1 - (1 - \varepsilon) \exp\left(-\frac{s\xi}{\lambda_{1-\varepsilon}}\right), & s\xi \geq 0. \end{cases} \quad (15)$$

В данном случае центральная часть кинка состоит из двух участков с размерами порядка λ_ε и $\lambda_{1-\varepsilon}$, а его ширина равна $\lambda_s = \lambda_\varepsilon + \lambda_{1-\varepsilon}$:

$$\begin{pmatrix} \lambda_\varepsilon \\ \lambda_{1-\varepsilon} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon \\ 1-\varepsilon \end{pmatrix} \lambda_s, \quad \lambda_s = \left(\frac{1 - V^2}{2\Phi_m}\right)^{1/2}. \quad (16)$$

Если асимметричный потенциал $\Phi(u)$ имеет достаточно протяженную вершину с малой кривизной, то в центре кинка будет существовать еще один выделенный фрагмент с полушириной λ_c (см. формулы (12)).

Согласно хорошо известным положениям нелинейной механики [3,14], любая устойчивая уединенная волна (в нашем случае — краудионное возбуждение) может рассматриваться как частица с некоторыми значениями собственной полевой энергии E_s и эффективной массы покоя m_s . Общее выражение для энергии и массы возбуждения при $F \equiv 0$ легко получить, подставляя поле смещений $u_s(x - V_s t)$ в функционал энергии (1) и используя соотношение (7) при $q = s$:

$$E_s = \frac{I}{\sqrt{1 - V_s^2}}, \quad m_s = I, \quad (17)$$

$$I = \int_0^1 \sqrt{2\Phi(u)} du. \quad (18)$$

Мы не будем подробно анализировать зависимость E_s и m_s от формы и параметров потенциала $\Phi(u)$, так как этот вопрос с достаточной полнотой освещен в обзоре [8]. Отметим только, что при рассмотрении краудиона в реальном кристалле с учетом упругой податливости кристаллической матрицы формулы (17) можно использовать только для оценок его энергии и массы по порядку величины, а точные значения этих параметров определяются не только потенциалом $\Phi(u)$, но и упругими свойствами кристаллической матрицы [9].

Перейдем теперь к анализу свойств краудионов (кинков), соответствующих более сложным формам

потенциала $\Phi(u)$. Как уже отмечалось во введении, в достаточно сложных кристаллических структурах периодическая функция $\Phi(u)$ на одном периоде $0 \leq u < 1$ может иметь несколько ям (точек абсолютного минимума) и такое же количество разделяющих их барьеров (точек максимумов). В этом случае устойчивым стационарным решением уравнения Клейна — Гордона (3) соответствуют кинки с дробными топологическими зарядами $q = \sigma$, где $-1 < \sigma < 1$: такие кинки соединяют однородные состояния, фиксированные на бесконечности любой парой соседних ям потенциала $\Phi(u)$, разнесенных на расстояние $|\sigma|$. Описание дробных кинков проведем на примере двухъямного асимметричного потенциала $\Phi(u)$ (рис. 2,б), имеющего два набора точек абсолютного минимума: $u_n = n$ и $u_v = v = n + \delta$, где $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, $0 < \delta < 1$. Два набора точек максимумов такого потенциала обозначим символами $u_{m1} = m_1$ и $u_{m2} = m_2$, где $m_1 = n + \varepsilon_1$, $m_2 = n + \varepsilon_2$, $0 < \varepsilon_1 < \delta < \varepsilon_2 < 1$. В общем случае барьеры между ямами могут иметь различную высоту $\Phi_{m1} = \Phi(u_{m1})$ и $\Phi_{m2} = \Phi(u_{m2})$.

В отсутствие внешней силы ($F \equiv 0$) уравнение (3) имеет две совокупности пространственно однородных устойчивых решений $u_n = n$ и $u_v = v$, соответствующих ямам потенциала $\Phi(u)$: $\Phi(u_n) = \Phi(u_v) \equiv 0$. В данном случае физический вакуум для поля $u(x, t)$ состоит из двух неэквивалентных наборов пространственно однородных состояний u_n и u_v , кратность его вырождения в два раза больше, чем для однодолинного потенциала $\Phi(u)$. Дробные краудионы (субкинки) $u_\sigma(x - V_\sigma t)$ представляют собой нелинейные солитоноподобные возбуждения такого вакуума: отдельное возбуждение — размытая граница между соседними однородными состояниями из различных наборов, разделенных интервалами $|\sigma_i|$: параметр σ может принимать значения $\sigma_1 = \pm \delta$ и $\sigma_2 = \pm(1 - \delta)$ (рис. 2,в). Увеличение степени вырождения вакуума приводит к возрастанию числа независимых элементарных возбуждений: в рассматриваемом случае возможно существование двух типов краудионов и двух типов антикраудионов.

Поле смещений $u_\sigma(x - V_\sigma t)$ дробного краудиона описывает локализованное сгущение или разрежение атомов в плотноупакованном ряду и определяется для любого конкретного значения σ_i соотношениями (7) и (8). Внутренняя структура дробных краудионов аналогична структуре полных краудионов: она определяется формой потенциала $\Phi(u)$ на интервалах σ_i , соединяющих соседние точки минимума (см. формулы (9)–(16)).

Характерное значение ширины дробного краудиона λ_{σ_i} можно оценить по формуле

$$\lambda_{\sigma_i} = |\sigma_i| \left(\frac{1 - V_{\sigma_i}^2}{2\Phi_{mi}} \right)^{1/2}, \quad i = 1, 2. \quad (19)$$

Дробные краудионы, как и полные, обладают свойствами псевдочастиц с собственными энергиями E_{σ_i} и эффективными массами покоя m_{σ_i} , которые определяются выражениями

$$E_{\sigma_i} = \frac{I_{\sigma_i}}{\sqrt{1 - V_{\sigma_i}^2}}, \quad m_{\sigma_i} = I_{\sigma_i}; \quad (20)$$

$$I_{\sigma_i} = \int_0^{|\sigma_i|} \sqrt{2\Phi[u - (i-1)|\sigma_i|]} du, \quad i = 1, 2. \quad (21)$$

2. Расщепленные краудионы

Рассмотренный в конце предыдущего раздела многоямный решеточный потенциал $\Phi(u)$ — явление, по-видимому, исключительное и редко встречающееся в реальных ситуациях. Как в физике краудионов, так и в некоторых других разделах физики значительно более вероятной является реализация многобарьерного потенциала $\Phi(u)$ [8,10–13,17,18,24]. Качественное представление о тонкой структуре полного краудиона с топологическим зарядом $s = \pm 1$ в кристаллах с многобарьерным потенциалом $\Phi(u)$ дает формула (7) при $q = s$: величина создаваемой краудионом деформации плотноупакованного ряда атомов $u'_s(\xi)$ имеет максимумы и минимумы, соответствующие экстремумам $\Phi(u)$, а график поля смещений $u_s(\xi)$ приобретает вид мультикинка, который состоит из набора мелких кинков. Число таких кинков равно числу максимумов $\Phi(u)$ на интервале $(0,1)$, а высоты имеют величину порядка ширины отдельных барьеров. Такую структуру можно интерпретировать как расщепление уединенной волны с целым топологическим зарядом $u_s(\xi)$ на совокупность связанных между собой и движущихся с единой скоростью V_s уединенных волн с дробными топологическими зарядами σ_i : при этом $\text{sgn}(\sigma_i) = \text{sgn}(s)$ и $\sum_i \sigma_i = s$. Важно подчеркнуть, что отдельные фрагменты мультикинка, похожие на субкинки, не являются независимыми:

их форма и взаимное расположение однозначно заданы и связаны между собой. Для того чтобы отличать эти образования от свободных субкраудионов, будем в дальнейшем использовать для их обозначения термин «частичные (или виртуальные) краудионы». Строгое аналитическое описание мультикинка как суммы частичных кинков получено для ряда конкретных потенциалов $\Phi(u)$ [8,11,12], например для потенциала (6). Предлагаемый ниже качественный анализ позволяет установить условия, при которых полный краудион (кинк) можно приблизительно представить как совокупность связанных субкраудионов в тех случаях, когда нет возможности получить решение уравнения Клейна–Гордона в явном виде.

В данном разделе мы рассмотрим двухбарьерный потенциал $\Phi(u)$ произвольной формы, который в пределах одного периода $0 \leq u < 1$ имеет два различных по глубине минимума, разделенных двумя барьерами (рис. 2,з). Для обозначения точек минимумов и максимумов потенциала $\Phi(u)$ используем введенные в предыдущем разделе символы u_n , u_v , u_{m1} и u_{m2} : точки абсолютных минимумов u_n пронумерованы целыми числами $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$; точки локальных минимумов u_v — дробными числами $v = n + \delta$, где $0 < \delta < 1$; точки максимумов u_{mi} ($i = 1, 2$) — дробными числами $m_i = n + \varepsilon_i$, где $0 < \varepsilon_1 < \delta < \varepsilon_2 < 1$. По определению, $\Phi(u_n) \equiv 0$, а локальный минимум будем характеризовать параметром $\Phi(u_v) = \Delta$; высоту барьеров, разделяющих долины потенциала $\Phi(u)$, обозначим $\Phi(u_{mi}) = \Phi_{mi}$. Очевидно, что в пределе $\Delta \rightarrow 0$ мы приходим к уже изученному случаю двухъямного потенциала.

Рассматриваемый двухбарьерный потенциал допускает существование солитоноподобного возбуждения $u_s(x - V_s t)$ с целым топологическим зарядом $s = \pm 1$, заданным соответствующими граничными условиями. В данном случае в качестве центра краудиона (кинка) удобно рассматривать точку $x_s = V_s t$, в которой смещение имеет величину $u_s(0) = \delta$, т.е. совпадает с точкой локального минимума. При этом условии второй интеграл уравнения (3) в отсутствие внешней силы ($F \equiv 0$) примет вид

$$\int_{\delta}^{u_s} \frac{du}{\sqrt{2\Phi(u)}} = s \frac{x - V_s t}{\sqrt{1 - V_s^2}}. \quad (22)$$

Согласно соотношению (7), на оси $\xi = x - V_s t$ существуют также две точки максимума ξ_i для модуля деформации $|u'_s(\xi)|$:

$$\xi_i = s \sqrt{1 - V_s^2} \int_{\delta}^{\varepsilon_i} \frac{du}{\sqrt{2\Phi(u)}}, \quad i = 1, 2. \quad (23)$$

Легко видеть, что вне интервала (ξ_1, ξ_2) поле смещений $u_s(\xi)$ имеет структуру, которая описывается верхней и нижней строчками формулы (11), а характерная протяженность соответствующих крыльев кинка λ_0 определяется величиной производной $\Phi''(0)$. Отметим только, что в данном случае стандартной оценкой для параметра u^* может служить значение $u^* \approx 1/8$, если $\delta \approx 1/2$.

Центральная часть кинка имеет протяженность $d_s = \xi_2 - \xi_1$:

$$d_s = \sqrt{1 - V_s^2} \int_{\varepsilon_1}^{\varepsilon_2} \frac{du}{\sqrt{2\Phi(u)}}. \quad (24)$$

Для того чтобы получить представление о структуре поля смещений $u_s(\xi)$ вблизи центра кинка $\xi = 0$ и оценить характерное значение параметра d_s , воспользуемся квадратичной аппроксимацией потенциала $\Phi(u)$ в окрестности точки локального минимума на некотором интервале $2u^* < \varepsilon_2 - \varepsilon_1$:

$$\Phi(u) \approx \Delta + \frac{1}{2} \Phi''(\delta)(u - \delta)^2, \quad |u - \delta| \leq u^*. \quad (25)$$

Подстановка (25) в (22) и несложные вычисления приводят к следующим выражениям:

$$u_s(\xi) = \delta + \left(\frac{2\Delta}{\Phi''(\delta)} \right)^{1/2} \operatorname{sh} \left(\frac{s\xi}{\lambda_c^*} \right), \quad \xi \rightarrow 0; \quad (26)$$

$$\lambda_c^* = \left(\frac{1 - V_s^2}{\Phi''(\delta)} \right)^{1/2}.$$

Обсудим вопрос о зависимости ширины центральной части кинка d_s от параметров потенциала $\Phi(u)$. Если параметр Δ и высоты барьеров Φ_{mi} имеют одинаковый порядок величины, то величину интеграла (24) можно оценить с помощью теоремы о среднем:

$$d_s = \sqrt{1 - V_s^2} \sum_{i=1}^2 |\delta - \varepsilon_i| \left(\frac{C_i}{\sqrt{2\Phi_{mi}}} + \frac{1 - C_i}{\sqrt{2\Delta}} \right), \quad (27)$$

$$0 < C_1, C_2 < 1.$$

Специальный интерес представляет предельный случай очень глубокого локального минимума потенциала $\Phi(u)$, когда $\Delta \rightarrow 0$. В этом случае протяженность центральной части кинка аномально возрастает согласно асимптотической оценке:

$$d_s \gtrsim d_c = \lambda_c^* \ln \left[\frac{2(u^*)^2 \Phi''(\delta)}{\Delta} \right], \quad \Delta \rightarrow 0. \quad (28)$$

Следует отметить, что неограниченное возрастание $d_s(\Delta)$ при $\Delta \rightarrow 0$ не происходит только в случае «экзотического» двухбарьерного и соответствующего ему предельного двухдолинного потенциалов, для которых $\Phi''(\delta) = \infty$. Пусть, например, на интервале $\varepsilon_1 < u < \varepsilon_2$ потенциал $\Phi(u)$ допускает аппроксимацию

$$\Phi(u) = \Delta + \frac{\Phi_{mi}}{|\varepsilon_i - \delta|^\gamma} |u - \delta|^\gamma, \quad 1 < \gamma < 2, \quad i = 1, 2. \quad (29)$$

В этом случае ширина центральной части кинка $d_s(\Delta)$ остается конечной при $\Delta \rightarrow 0$, но аномально возрастает при $\gamma \rightarrow 2$:

$$d_s(0) = \frac{2}{2 - \gamma} \sum_{i=1}^2 |\varepsilon_i - \delta| \left(\frac{1 - V_s^2}{2\Phi_{mi}} \right)^{1/2}. \quad (30)$$

Таким образом, при достаточно малых значениях Δ центральная часть кинка $d_s(\Delta)$ соединяет два фрагмента с центрами в точках ξ_1 и ξ_2 , форма которых близка к форме субкинков с топологическими зарядами $\sigma_1 = \pm \delta$ и $\sigma_2 = \pm (1 - \delta)$ и ширинами λ_{σ_i} (19). В центре краудииона на интервале d_s атомы плотноупакованного ряда занимают позиции, близкие с экспоненциальной точностью к точкам локального минимума, а потенциальная энергия каждого из этих атомов имеет значение, близкое к Δ . Этот фрагмент краудииона представляет собой своеобразный дефект упаковки атомных рядов — одномерный аналог хорошо известных в физике кристаллов плоских дефектов упаковки или антифазных границ [2,25]*.

* В физике кристаллов часто обсуждается аналогия между топологическим солитоном в модели одномерного кристалла Френкеля — Конторовой и дислокацией в трехмерном кристалле. С этой точки зрения описанные здесь частичные (виртуальные) краудиионы и соединяющие их дефекты упаковки атомных рядов являются одномерными аналогами частичных дислокаций и дефектов упаковки атомных плоскостей.

Переходя к анализу собственной энергии краудииона в случае двухбарьерного потенциала с достаточно глубоким локальным минимумом, представим функцию $\Phi(u)$ в виде суммы двухдолинного потенциала $\Phi^{(DW)}(u)$ ($\Phi^{(DW)}(0) = \Phi^{(DW)}(\delta) = 0$) и некоторой достаточно малой положительно определенной функции $\varphi(u)$, которая обращается в нуль на концах и вне интервала между точками максимумов ($\varepsilon_1, \varepsilon_2$):

$$\Phi(u) = \Phi^{(DW)}(u) + \varphi(u). \quad (31)$$

Пусть $\max \varphi(u) = \varphi(\delta) = \Delta \ll \Phi_{m1}, \Phi_{m2}$, тогда при малых значениях Δ можно воспользоваться разложением

$$\sqrt{\Phi(u)} \approx \sqrt{\Phi^{(DW)}(u)} + \frac{\Delta}{2\sqrt{\Phi^{(DW)}(u) + \Delta}}.$$

В этом приближении энергия полного краудииона (17) равна

$$E_s \approx E_{\sigma_1} + E_{\sigma_2} + \frac{\Delta}{1 - V_s^2} d_s(\Delta). \quad (32)$$

Здесь E_{σ_i} — энергия субкраудииона с топологическим зарядом σ_i , определяемая формулой (20), а d_s — расстояние между центрами субкраудиионов, величину которого можно оценить с помощью интеграла:

$$d_s(\Delta) = \sqrt{1 - V_s^2} \int_{\varepsilon_1}^{\varepsilon_2} \frac{du}{\sqrt{2[\Phi^{(DW)}(u) + \Delta]}}. \quad (33)$$

Последнее слагаемое в (32) имеет смысл энергии дефекта упаковки, соединяющего частичные краудиионы.

На основании выполненного выше анализа приходим к выводу, что в случае любого двухбарьерного потенциала $\Phi(u)$ с достаточно глубоким локальным минимумом полный краудиион с топологическим зарядом s можно приблизительно рассматривать как совокупность однозначно связанных между собой, но пространственно разделенных субкраудиионов одинакового знака с дробными топологическими зарядами $\sigma_1 = s\delta$ и $\sigma_2 = s(1 - \delta)$, которые соединены протяженным дефектом упаковки d_s . Такой краудиион (или соответствующий ему кинк) будем называть расщепленным, а ограничивающие его субкраудиионы — частичными (или виртуальными) краудиионами. Представления о расщеплении краудиионов полез-

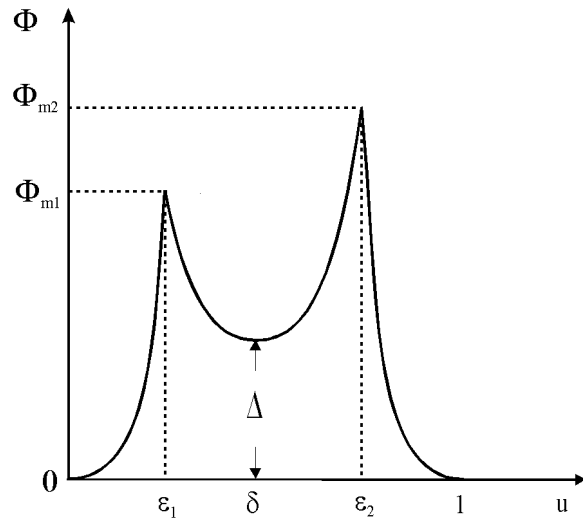


Рис. 3. Кусочно-непрерывная параболическая аппроксимация двухбарьерного потенциала $\Phi(u)$.

ны для приближенного описания краудиионных возбуждений в кристаллах со сложной формой кристаллического рельефа $\Phi(u)$ и физически оправданы при выполнении неравенства $\lambda_{\sigma_i} \ll d_s$, которое эквивалентно неравенству $\Delta \ll \Phi_{mi}$.

Достаточно хорошей иллюстрацией сформулированных выше общих положений может служить явное точное решение задачи о расщепленном краудиионе для кусочно-непрерывного параболического потенциала следующего вида (рис. 3):

$$\Phi(u) = \begin{cases} \frac{1}{2} K_0^2 u^2, & 0 \leq u \leq \varepsilon_1; \\ \Delta + \frac{1}{2} K_c^2 (u - \delta)^2, & \varepsilon_1 \leq u \leq \varepsilon_2; \\ \frac{1}{2} K_0^2 (u - 1)^2, & \varepsilon_2 \leq u \leq 1; \end{cases} \quad (34)$$

$$\sigma_i^2 K_0^2 \geq 2\Delta, \quad i = 1, 2.$$

В качестве независимых параметров этого потенциала будем рассматривать кривизны в точках минимума $K_0^2 = \Phi''(0)$, $K_c^2 = \Phi''(\delta)$, глубину локального минимума $\Delta = \Phi(\delta)$ и его положение δ . Тогда положение точек максимумов ε_1 и ε_2 , а также высоты барьеров Φ_{m1} и Φ_{m2} являются функциями этих параметров и соответствующие зависимости удобно записать в виде следующих соотношений:

$$\varepsilon_i - \delta = \frac{(-1)^i}{K_0^2 - K_c^2} \left[|\sigma_i| K_0^2 - \sqrt{\sigma_i^2 K_0^2 K_c^2 + 2(K_0^2 - K_c^2)\Delta} \right], \quad (35)$$

$$\Phi_{mi}(\Delta) = \frac{1}{2} K_c^2 (\varepsilon_i - \delta)^2 + \Delta, \quad i = 1, 2.$$

Поле смещений полного краудиона определяется формулами

$$u_s(\xi) = \begin{cases} \varepsilon_1 \exp\left(\frac{s\xi + \lambda_{c1}}{\lambda_0}\right), & s\xi \leq -\lambda_{c1}; \\ \delta + \lambda_\Delta \operatorname{sh}\left(\frac{s\xi}{\lambda_c}\right), & -\lambda_{c1} \leq s\xi \leq \lambda_{c2}; \\ 1 - (1 - \varepsilon_2) \exp\left(\frac{\lambda_{c2} - s\xi}{\lambda_0}\right), & s\xi \geq \lambda_{c2}; \end{cases} \quad (36)$$

$$K_0 \lambda_0 = K_c \lambda_c = \sqrt{1 - V_s^2}, \quad K_c \lambda_\Delta = \sqrt{2\Delta},$$

$$\lambda_{ci} = \lambda_c \ln \left[\frac{|\varepsilon_i - \delta| + \sqrt{\lambda_\Delta^2 + (\varepsilon_i - \delta)^2}}{\lambda_\Delta} \right], \quad i = 1, 2. \quad (37)$$

Деформация $u'_s(x - V_s t)$ в уединенной волне (36) имеет два экстремума в точках $x_i = V_s t + (-1)^i \lambda_{ci}$. Обе точки x_i перемещаются со скоростью V_s и могут рассматриваться как центры виртуальных субкинков, соединенных дефектом упаковки с шириной

$$d_s(\Delta) = x_2 - x_1 = \lambda_c \times \ln \left\{ \frac{[\sqrt{\Phi_{m1}(\Delta)} + \sqrt{\Phi_{m1}(\Delta) - \Delta}][\sqrt{\Phi_{m2}(\Delta)} + \sqrt{\Phi_{m2}(\Delta) - \Delta}]}{\Delta} \right\}. \quad (38)$$

Такая интерпретация соответствует виду точного выражения для энергии полного краудиона, которое представляет собой сумму энергий виртуальных субкраудионов $E_{\sigma i}(\Delta)$ и энергии дефекта упаковки:

$$E_s(\Delta) = E_{\sigma 1}(\Delta) + E_{\sigma 2}(\Delta) + \frac{\Delta}{1 - V_s^2} d_s(\Delta),$$

$$E_{\sigma i}(\Delta) = \frac{1}{K_0 K_c \sqrt{1 - V_s^2}} \times$$

$$\times \left\{ K_0 \sqrt{\Phi_{mi}(\Delta)[\Phi_{mi}(\Delta) - \Delta]} + K_c \Phi_{mi}(\Delta) \right\}. \quad (39)$$

В пределе $\Delta \rightarrow 0$ ширина дефекта упаковки неограниченно возрастает по асимптотическому закону:

$$d_s(\Delta) \approx \lambda_c \ln \left[\frac{4 \sqrt{\Phi_{m1}(0)\Phi_{m2}(0)}}{\Delta} \right], \quad (40)$$

$$2\Phi_{mi}(0) = \frac{\sigma_i^2 K_0^2 K_c^2}{(K_0 + K_c)^2}.$$

При этом его энергия стремится к нулю, а виртуальные субкраудионы превращаются в независимые дробные краудионы с топологическими зарядами $\sigma_1 = s\delta$ и $\sigma_2 = s(1 - \delta)$, которые имеют ширины $\lambda_{\sigma i}$ и энергии $E_{\sigma i}$:

$$\lambda_{\sigma i} = |\sigma_i| \left(\frac{1 - V_{\sigma i}^2}{2\Phi_{mi}(0)} \right)^{1/2}, \quad E_{\sigma i} = |\sigma_i| \left(\frac{\Phi_{mi}(0)}{2(1 - V_{\sigma i}^2)} \right)^{1/2}, \quad i = 1, 2. \quad (41)$$

Проведенный в данном разделе анализ позволяет сделать принципиально важный вывод общего характера относительно асимптотического поведения уединенных волн (краудионов, кинков) при трансформации любого двухбарьерного потенциала $\Phi(u)$ в двухъямный потенциал $\Phi^{(DW)}(u)$. В пределе $\Delta \rightarrow 0$ энергия дефекта упаковки обращается в нуль ($d_s(\Delta) \Delta \rightarrow 0$) и происходит асимптотический распад полного возбуждения на дробные. Это означает, что дополнительное вырождение физического вакуума, появляющееся при такой трансформации, вызывает кардинальную перестройку спектра нелинейных возбуждений системы: уединенные волны с целым топологическим зарядом исчезают и роль элементарных солитоноподобных возбуждений переходит к уединенным волнам с дробными топологическими зарядами. Этот вывод без каких-либо затруднений обобщается на случай потенциалов $\Phi(u)$ с любым количеством барьеров на интервале $(0, 1)$.

Применительно к динамике плотноупакованных атомных рядов в кристаллах полученный результат означает следующее: если кристаллический потенциал для них $\Phi(u)$ является многоямным, то при внедрении в эти ряды дополнительного атома или удалении из них атома (например, под влиянием радиации) не возникает локализованных структурных состояний типа межузельных атомов или вакансий, они неизбежно делокализуются, смещая при этом атомный ряд на величину элементарного вектора трансляций. Возможно, что в некоторых реальных кристаллических структурах две тенденции взаимно компенсируют одна другую: тенденция к локализации краудионов за счет большой высоты барьеров кристаллического потенциального рельефа ослаб-

ляется наличием в нем глубоких локальных минимумов. Это обстоятельство может оказаться важным при интерпретации диффузионных и радиационных свойств сложных кристаллов.

Однако следует отметить, что данное заключение нуждается в уточнении. Напомним, что оно получено в континуальном приближении для структурно-однородного кристалла. Если учесть существующие благодаря дискретности решеточной структуры барьеры Пайерлса или создаваемые локальными дефектами и полями внутренних напряжений потенциальные барьеры для краудионов, то пиннинг частичных краудионов на таких барьерах может существенно ограничивать указанную делокализацию [4,26]. Тенденция к распаду полных краудионов ослабляется также эффектами пространственной дисперсии — учетом в уравнении движения (3) производных более высокого порядка [22].

В заключение данного раздела отметим, что проблема расщепленных топологических солитонов имеет еще один интересный аспект — наличие внутренней динамики таких возбуждений [8,18], однако обсуждение данных вопросов применительно к динамике краудионов выходит за рамки настоящей работы.

3. Специальные типы субкраудионов

В разд. 1 были определены и обсуждены дробные краудионы, которые существуют только в атомных рядах, помещенных в многоямный потенциальный рельеф (рис. 2,в). Однако можно указать специальные вполне реальные обстоятельства, способствующие появлению дробных краудионов и в случаях многобарьерного кристаллического рельефа $\Phi(u)$ (рис. 2,з): такими обстоятельствами являются наличие внешней силы $F \neq 0$ или учет в уравнении движения для поля $u(x, t)$ силы динамического трения $f(\dot{u})$, которая в общем случае представляет собой некоторую нечетную функцию скорости смещений атомов $f(-\dot{u}) = -f(\dot{u})$.

Сначала предположим, что трение отсутствует ($f(\dot{u}) \equiv 0$), и проанализируем условия существования краудионов в атомных рядах, помещенных в потенциал $\Phi^{(F)}(u) = \Phi(u) - Fu$, где $\Phi(u)$ — двухбарьерный потенциал (рис. 2,з) с достаточно глубоким локальным минимумом Δ , а $F = \text{const}$ — постоянная, достаточно малая по величине сила ($\Delta \ll \Phi_{mi}$, $|F| \ll \Phi_{mi}$, $i = 1, 2$). Сила F , вообще говоря, разрушает периодичность потенциала и снимает вырождение устойчивых энергетических состояний, которое является необходимым условием существования стационарных солитонов

подобных возбуждений с отличным от нуля топологическим зарядом. Поэтому при произвольных значениях F уравнение Клейна — Гордона (3) не имеет решений в виде устойчивых уединенных волн стационарного профиля с $q = s = \pm 1$, подобных тем, которые существуют в отсутствие силы и описаны в разд. 2. Исключением являются два выделенных критических значения силы $F = F_i$ ($i = 1, 2$), при которых потенциал $\Phi^{(F)}(u)$ допускает существование устойчивых уединенных волн стационарного профиля, но уже с некоторыми дробными топологическими зарядами $q = \sigma_i$, $|\sigma_i| < 1$.

В справедливости данного утверждения легко убедиться, анализируя дифференциальные свойства потенциала $\Phi^{(F)}(u)$. При выполнении неравенств $\Delta \ll \Phi_{mi}$ и $|F| \ll \Phi_{mi}$ потенциал $\Phi^{(F)}(u)$ имеет два семейства точек минимумов:

$$u_n(F) = n + u_0(F), \quad u_v(F) = (n + \delta) + u_\delta(F); \quad (42)$$

здесь $u_0(F)$ и $u_\delta(F)$ — соответственно смещения глобального и локального минимумов потенциала $\Phi(u)$ под действием силы F , которые можно найти путем решения уравнения $d\Phi(u)/du = F$. Это означает, что уравнение (3) при $F \neq 0$ допускает совокупность локально устойчивых однородных состояний $u_n(F)$ и $u_v(F)$, периодически (с периодом 1) распределенных на оси смещений. Потенциальные энергии таких состояний $\Phi^{(F)}[u_n(F)]$ и $\Phi^{(F)}[u_v(F)]$ при произвольных значениях силы F , вообще говоря, различны, но существует одно положительное $F_1 > 0$ и одно отрицательное $F_2 < 0$ значения, при которых энергии пар соседних состояний совпадают (рис. 4). Эти состояния разделены интервалами $\delta + u_\delta(F_1) - u_0(F_1)$ и $(1 - \delta) + u_0(F_2) - u_\delta(F_2)$, а значения силы F_i ($i = 1, 2$) являются решениями уравнения

$$\begin{aligned} & \Phi[\delta + u_\delta(F)] - \Phi[u_0(F)] + \\ & + [(i - 1 - \delta) - u_\delta(F) + u_0(F)] F = 0. \end{aligned} \quad (43)$$

Рассматривая в дальнейшем потенциал $\Phi^{(F)}(u)$ при критических значениях силы $F = F_i$ в пределах одного периода $n = 0$, введем обозначения:

$$\max [\Phi(u) - F_i u] - \min [\Phi(u) - F_i u] = \tilde{\Phi}_m^{(i)}, \quad (44)$$

$$\pm [u_0(F_i) - u_\delta(F_i) + (i - 1 - \delta)] = \tilde{\sigma}_i, \quad i = 1, 2. \quad (45)$$

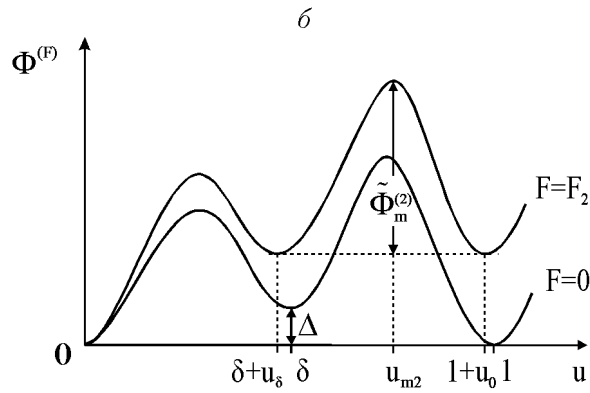
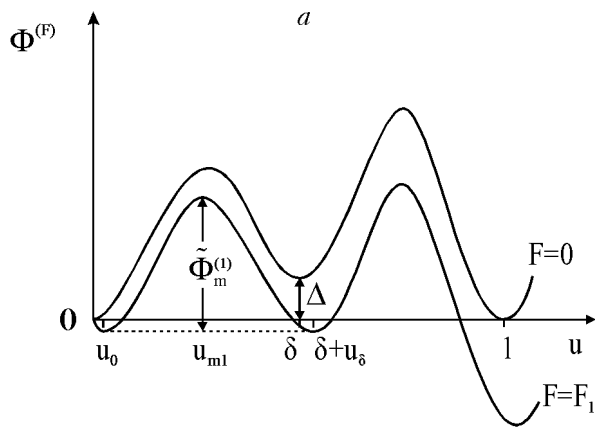


Рис. 4. Трансформация двухбарьерного потенциала $\Phi(u)$ под действием внешней однородной силы F : *a* — исходная ($F=0$) и критическая ($F=F_1$) конфигурации суммарного потенциала $\Phi^{(F)}(u) = \Phi(u) - Fu$ для положительных значений силы F_1 ; *b* — то же для отрицательных значений силы F_2 .

Наличие двух соседних пространственно-одно-родных состояний $u_0(F_i) + (i-1)$ и $\delta + u_\delta(F_i)$ с одинаковыми значениями потенциальной энергии (рис. 4) создает необходимое условие существования устойчивых уединенных волн стационарного профиля $u(x, t) = u_\sigma(x - V_\sigma t)$, движущихся с произвольной постоянной скоростью V_σ . Топологические заряды этих волн $\sigma = \tilde{\sigma}_i$ ($i = 1, 2$) определяются соотношением (45), их можно задать граничными условиями, фиксируя на бесконечности указанные однородные состояния. Внутренняя структура таких возбуждений и соответствующих им кинков аналогична структуре дробных краудионов, описанных в разд. 1 (рис. 2, в). Первый и второй интегралы уравнения (3) с учетом граничных условий, которые фиксируют топологический заряд $\tilde{\sigma}_i$, определяются выражениями, аналогичными (7) и (8): в этих выражениях следует полагать $q_i = \tilde{\sigma}_i$, потенциал $\Phi(u)$ следует заменить на перенормированный потенциал

$$\tilde{\Phi}^{(i)}(u) = \Phi(u) - \Phi[u_0(F_i)] - [u - u_0(F_i) - (i-1)]F_i, \quad (46)$$

$$i = 1, 2,$$

а в качестве нижнего предела интегрирования в (8) вместо ε_i взять u_{mi} — точку максимума функции $\tilde{\Phi}^{(i)}(u)$, который разделяет рассматриваемые долины одинаковой глубины и имеет высоту $\tilde{\Phi}_m^{(i)}$ (44).

Энергию, эффективную массу покоя и характерную ширину данных краудионов можно вычислить с помощью формул (19) и (20), произведя замену Φ_{mi} на $\tilde{\Phi}_m^{(i)}$ и интеграла $I_{\sigma i}$ на интеграл

$$\tilde{I}_{\sigma i} = \int_0^{|\tilde{\sigma}_i|} \sqrt{2\tilde{\Phi}^{(i)}[u + u_0(F_i) + (i-1)(1 - |\tilde{\sigma}_i|)]} du, \quad (47)$$

$$i = 1, 2.$$

Легко показать, что при достаточно малых значениях параметра Δ в первом приближении $u_0(F) = F/\Phi''(0)$ и $u_\delta(F) = F/\Phi''(\delta)$, а решение уравнения (43) для критической силы F_i и топологические заряды «критических краудионов» $\tilde{\sigma}_i$ имеют вид

$$F_i = \frac{\Delta}{\delta + 1 - i}, \quad (48)$$

$$\tilde{\sigma}_i = \pm (i-1-\delta) \left[1 + \frac{\Delta}{(i-1-\delta)^2} \frac{\Phi''(0) - \Phi''(\delta)}{\Phi''(0)\Phi''(\delta)} \right], \quad (49)$$

$$i = 1, 2.$$

При $\Delta \rightarrow 0$ «критические краудионы» превращаются в дробные с топологическими зарядами $\sigma_1 = \pm \delta$ и $\sigma_2 = \pm (1 - \delta)$, а при малых, но конечных значениях Δ , параметры критических и обычных субкраудионов отличаются на малые величины, пропорциональные Δ .

Отметим также, что соотношению (48) можно придать простой физический смысл. Величина Δ представляет собой линейную плотность энергии (в исходных единицах Δ/b), т.е. силу натяжения полуограниченного дефекта упаковки, который возникает при появлении в кристалле отдельного неустойчивого частичного краудиона. Такое натяжение эквивалентно приложенной к частичному краудиону силе, выталкивающей его из кристалла:

$$\mathcal{F}_{\sigma i}^{(\Delta)} = (-1)^{i+1} \text{sgn}(\sigma_i) \Delta. \quad (50)$$

Вместе с тем при наличии внешней силы F , приложенной к атомам плотноупакованного ряда, на краудион с топологическим зарядом σ_i действует эффективная сила [3,9]*

$$\mathcal{F}_{\sigma_i}^{(F)} = -\sigma_i F . \quad (51)$$

Легко проверить, что соотношение (48) совпадает с условием баланса этих сил $\mathcal{F}_{\sigma_i}^{(\Delta)} + \mathcal{F}_{\sigma_i}^{(F)} = 0$, которое превращает частичный краудион в устойчивый субкраудион, движущийся с произвольной постоянной скоростью.

Прямое экспериментальное наблюдение критических субкинков затруднено в связи с трудностями реализации точного равенства $F = F_i$. Поэтому основной интерес, с точки зрения эксперимента, имеют аномалии кинетических характеристик систем с двухбарьерным потенциалом $\Phi(u)$, которые должны иметь место при $F \rightarrow F_i$. Такие аномалии зарегистрированы, например, при изучении низкотемпературной пластичности ряда объемно-центрированных металлов с двухбарьерным рельефом Пайерлса для дислокаций [13,27–30].

Условия существования устойчивых стационарных краудионов (уединенных волн) приобретают дополнительную специфику при учете в уравнении (3) для поля смещений $u(x, t)$ наряду с потенциальной силой F также силы динамического трения $f(\dot{u})$:

$$\ddot{u} - u'' - f(\dot{u}) + \frac{d}{du} \Phi(u) = F . \quad (52)$$

Обсудим те изменения, которые вносит сила динамического трения в условия существования дробных краудионов при $F = 0$. Выше мы убедились, что в случае двухбарьерного потенциала $\Phi(u)$ (рис. 2,з) в отсутствие внешней силы существование уединенных волн стационарного профиля с дробным топологическим зарядом невозможно, однако учет силы трения кардинально меняет ситуацию. Представим двухбарьерный потенциал $\Phi(u)$ в виде суммы (31) некоторого двухъямного потенциала $\Phi^{(DW)}(u)$ с абсолютным промежуточным минимумом в точке δ (рис. 2,в) и положительной добавки $\varphi(u)$, которая достигает максимума в точке δ и вместе со своей первой производной обращается в нуль на границах интервалов $[0, 1]$ и $[\varepsilon_1, \varepsilon_2]$: $\varphi(\delta) = \Delta \ll \Phi_{mi}$, $\varphi'(\delta) = \varphi(0) = \varphi(1) = \varphi(\varepsilon_i) = \varphi'(0) = \varphi'(1) = \varphi'(\varepsilon_i) = 0$. Будем формально считать силу $f(\dot{u})$ вместе с по-

тенциалом $\varphi(u)$ достаточно малыми величинами и воспользуемся при анализе нелинейных возмущений поля $u(x, t)$ методами теории возмущений. Соответствующие неравенства, обеспечивающие удовлетворительную сходимость процедуры теории возмущений, будут получены в конце раздела.

В качестве нулевого приближения теории возмущений выберем субкраудионы, соответствующие потенциалу $\Phi^{(DW)}(u)$:

$$u(x, t) = u_{\sigma_i}(x - Vt) + \eta(x - Vt) , \quad (53)$$

$$(1 - V^2) u''_{\sigma_i} - \frac{d}{du_{\sigma_i}} \Phi^{(DW)}(u_{\sigma_i}) = 0 , \quad (54)$$

$$\sigma_i = \pm [i - 1 + (3 - 2i) \delta] , \quad i = 1, 2 . \quad (55)$$

Возмущение поля смещений $\eta(\xi)$ и параметр V являются неизвестными величинами, подлежащими определению. Естественно считать, что динамическое трение не влияет на систематику и величины топологических зарядов, а может только в какой-то мере исказить структуру центральных частей краудионов. Формально данное предположение сводится к граничным условиям для возмущения $\eta(\xi)$ вида

$$\eta(\pm \infty) = \eta'(\pm \infty) = 0 . \quad (56)$$

Первому приближению теории возмущений соответствуют равенства

$$\begin{aligned} \frac{d}{du} \Phi(u) &\approx \frac{d}{du_{\sigma_i}} \Phi^{(DW)}(u_{\sigma_i}) + \\ &+ \frac{d}{du_{\sigma_i}} \varphi(u_{\sigma_i}) + \frac{d^2}{du_{\sigma_i}^2} \Phi^{(DW)}(u_{\sigma_i}) \eta , \\ f(\dot{u}) &\approx -f(Vu'_{\sigma_i}) . \end{aligned}$$

В результате для возмущения $\eta(\xi)$ получаем линейное дифференциальное уравнение:

$$\begin{aligned} (1 - V^2) \eta'' - \frac{d^2}{du_{\sigma_i}^2} \Phi^{(DW)}(u_{\sigma_i}) \eta &= \\ = \frac{d}{du_{\sigma_i}} \varphi(u_{\sigma_i}) + f(Vu'_{\sigma_i}) . \end{aligned} \quad (57)$$

* К сожалению, в результате технической ошибки знак этой силы в работе [9] указан неправильно.

При наличии силы трения $f(\dot{u})$ волна стационарного профиля (53) не может удовлетворить уравнению (52) при произвольных значениях скорости V , поэтому задача сводится к определению не только функции $\eta(\xi)$, но и допустимых значений скорости краудиона $V = V_{\sigma_i}^{(f)}$: в общем случае эти значения зависят от вида и параметров функций $f(\dot{u})$ и $\Phi(u)$. Установить допустимые значения скорости можно с помощью известной в теории линейных дифференциальных уравнений теоремы об альтернативе [31,32]. Условием существования решения линейного неоднородного уравнения (57) с граничными значениями (56) является ортогональность правой части этого уравнения частному решению соответствующего ему однородного уравнения $\eta^{(0)}(\xi)$, имеющего такие же граничные значения. Найти это решение помогает уравнение нулевого приближения (54). Дифференцируя уравнение (54) по координате ξ , получаем

$$(1 - V^2)(u'_{\sigma_i})'' - \frac{d^2}{du_{\sigma_i}^2} \Phi^{(DW)}(u_{\sigma_i}) u'_{\sigma_i} = 0. \quad (58)$$

Сравнивая (58) с (57) и принимая во внимание отсутствие краудионных деформаций на бесконечности $u'_{\sigma_i}(\pm \infty) = 0$, приходим к заключению, что в качестве нужного нам частного решения однородного уравнения (57) можно взять $\eta^{(0)}(\xi) = u'_{\sigma_i}(\xi)$. Таким образом, определяемое теоремой об альтернативе условие сводится к уравнению

$$\int_{-\infty}^{\infty} u'_{\sigma_i}(\xi) f[V u'_{\sigma_i}(\xi)] d\xi = (-1)^i \operatorname{sgn}(\sigma_i) \Delta. \quad (59)$$

Так как производная $u'_{\sigma_i}(\xi)$ удовлетворяет соотношению (7) с потенциалом $\Phi^{(DW)}(u)$ и $q = \sigma_i$, а сила трения предполагается нечетной функцией скорости $f(-\dot{u}) = -f(\dot{u})$, то левую часть уравнения (59) можно выразить через потенциал $\Phi^{(DW)}(u)$ и представить его в виде

$$\mathcal{F}_{\sigma_i}^{(f)}(V) + (-1)^{i+1} \operatorname{sgn}(\sigma_i) \Delta = 0, \quad (60)$$

$$\mathcal{F}_{\sigma_i}^{(f)}(V) = \int_0^{|\sigma_i|} f \left[\frac{V \sqrt{2\Phi^{(DW)}}[u - (i-1)|\sigma_i|]}{\sqrt{1-V^2}} \right] du. \quad (61)$$

Таким образом, если атомы выделенного ряда испытывают действие силы динамического трения, то необходимым условием существования стационарных краудионных возбуждений с дробными топологическими зарядами является наличие вещественных решений $V = V_{\sigma_i}^{(f)}$ уравнения (60). Отметим также, что уравнение (60) позволяет интерпретировать величину $\mathcal{F}_{\sigma_i}^{(f)}(V)$ как эффективную силу динамического торможения краудиона, появление которой обусловлено диссипативными свойствами отдельных атомов. При такой интерпретации уравнение (60) представляет собой баланс двух сил: силы торможения $\mathcal{F}_{\sigma_i}^{(f)}(V)$ (61) и силы линейного натяжения $\mathcal{F}_{\sigma_i}^{(\Delta)}$ (50) полуограниченного дефекта упаковки, который возникает на бесконечности при появлении в кристалле частичного краудиона, если $\Delta \neq 0$.

В качестве примера, позволяющего получить решение рассматриваемой задачи в явном виде, рассмотрим случай линейного торможения атомов: $f(\dot{u}) = -\beta \dot{u}$, где β — коэффициент атомной вязкости. В этом случае

$$\mathcal{F}_{\sigma_i}^{(f)}(V) = -\frac{I_{\sigma_i} \beta V}{\sqrt{1-V^2}}, \quad (62)$$

$$I_{\sigma_i} = \int_0^{|\sigma_i|} \sqrt{2\Phi^{(DW)}}[u - (i-1)|\sigma_i|] du,$$

а скорость стационарного движения дробного краудиона с топологическим зарядом σ_i равна

$$V_{\sigma_i}^{(f)} = \frac{(-1)^{i+1} \operatorname{sgn}(\sigma_i) \Delta}{\sqrt{\Delta^2 + \beta^2 I_{\sigma_i}^2}}. \quad (63)$$

Анализ уравнения (57) для возмущения $\eta(\xi)$ вблизи центров дробных краудионов ξ_i с учетом оговоренных выше свойств потенциала $\Phi(u)$ и соотношения (63) позволяет получить оценку характерных значений возмущения:

$$\eta(\xi_i) = \frac{(-1)^i \Delta \sqrt{2\Phi_{mi}}}{I_{\sigma_i} |\Phi''(\epsilon_i)|}. \quad (64)$$

Следовательно, условие применимости континуального приближения $V_{\sigma_i}^{(f)} \ll 1$ и условие сходимости использованной выше процедуры теории возмущений $\eta(\xi_i) \ll u_{\sigma_i}(\xi_i) = i - 1 + (3 - 2i)\epsilon_i$ сводится к двум неравенствам:

$$\Delta \ll \beta I_{\sigma_i}, \quad \Delta \ll [i - 1 + (3 - 2i)\epsilon_i] \frac{|\Phi''(\epsilon_i)| I_{\sigma_i}}{\sqrt{2\Phi_{mi}}}. \quad (65)$$

Отметим, что описанные выше специфические динамические краудионы с дробным топологическим зарядом, существующие в вязкой кристаллической матрице, с общефизической точки зрения аналогичны хорошо известным в теории магнитных солитонов [24] доменным π -стенкам, движущимся в диссипативной магнитной среде с постоянной скоростью под действием однородного магнитного поля (так называемый уокеровский режим движения доменных стенок).

Проведенный выше анализ двух частных случаев легко обобщается и на случай одновременно присутствия в уравнении (52) внешней силы $F \neq 0$ и силы трения $f \neq 0$. В этом случае двухбарьерный потенциал $\Phi(u)$ (рис. 2,з) с достаточно глубоким промежуточным минимумом ($\Delta \ll \Phi_{mi}$) также допускает существование устойчивых уединенных волн стационарного профиля с дробными топологическими зарядами $\sigma_i = \pm \delta, \pm(1 - \delta)$. Скорость таких волн $V_{\sigma_i}^{(F,f)}$ определяется как силами F и f , так и параметрами потенциала $\Phi(u)$. В линейном по Δ и F приближении значения $V_{\sigma_i}^{(F,f)}$ являются решениями уравнения баланса силы натяжения дефекта упаковки (50), внешней силы (51) и силы трения (61):

$$\mathcal{F}_{\sigma_i}^{(\Delta)} + \mathcal{F}_{\sigma_i}^{(F)} + \mathcal{F}_{\sigma_i}^{(f)}(V) = 0. \quad (66)$$

Если торможение атомов имеет линейный характер, то для скорости $V_{\sigma_i}^{(F,f)}$ получаем выражение

$$V_{\sigma_i}^{(F,f)} = (-1)^{i+1} \operatorname{sgn}(\sigma_i) \frac{(-1)^i |\sigma_i| F + \Delta}{\sqrt{[(-1)^i |\sigma_i| F + \Delta]^2 + \beta^2 I_{\sigma_i}^2}}, \quad i = 1, 2. \quad (67)$$

В числителе этого выражения стоит суммарная сила, действующая на кинк со стороны дефекта упаковки и поля внешних сил; корректность полученного результата обеспечивается достаточно малой величиной этой силы. При равенстве этой силы нулю отличное от нуля трение ($\beta \neq 0$) допускает существование только статических дробных краудионов.

Заключение

Основная цель данного исследования — приращение к описанию краудионов в сложных кри-

сталлических структурах представлений о дробных и расщепленных топологических солитонах, сформулированных ранее при изучении других задач нелинейной механики [8]. Во введении изложены основные предпосылки, позволяющие свести задачу о динамике краудионного возбуждения в трехмерном кристалле к анализу одномерной модели Френкеля—Конторовой со сложным потенциалом подложки $\Phi(u)$ и соответствующего ей нелинейного уравнения Клейна—Гордона (3). Здесь же и в первом разделе статьи изложены в основном известные положения теории топологических солитонов: оригинальным моментом является максимально общая форма изложения, позволяющая единообразно описать структуру и свойства солитонов (краудионов) при любой сложной форме потенциального профиля $\Phi(u)$ и произвольных величинах и знаках топологических зарядов. Дана сравнительная характеристика солитонов с целочисленными и дробными топологическими зарядами как независимых устойчивых нелинейных возбуждений многократно вырожденного физического вакуума, отмечена общность и различия свойств полных солитонов и субсолитонов.

Во втором разделе в максимально общей форме описан эффект и условия расщепления полных солитонов (краудионов) на частичные, имеющий место в случае так называемого многобарьерного потенциала $\Phi(u)$. Ранее эффект расщепления был описан для нескольких типов конкретных симметричных двухбарьерных потенциалов $\Phi(u)$, допускающих явные решения уравнения Клейна—Гордона. В отличие от выполненных ранее исследований наш анализ не предполагает получения в явном виде точных решений уравнения Клейна—Гордона. Здесь описаны качественные предпосылки, позволяющие ввести понятие частичных (виртуальных) топологических солитонов и соединяющего их дефекта упаковки, а также получены асимптотические аналитические выражения для геометрических и энергетических характеристик отдельных фрагментов расщепленного солитона в случае двухбарьерного потенциала $\Phi(u)$ произвольного вида. Качественно описан асимптотический распад полного топологического солитона на свободные субсолитоны при трансформации двухбарьерного потенциала в двухъямный. Получено также в явном виде точное решение задачи о расщеплении и распаде полного солитона на примере параболического кусочно-непрерывного асимметричного потенциала $\Phi(u)$. Кратко обсуждены аналогия между расщепленными краудионами и расщеп-

ленными дислокациями и возможные физические эффекты в кристаллах со сложной структурой, связанные с расщеплением краудионов.

В третьем разделе статьи обсуждены специальные типы дробных топологических солитонов (краудионов), появление которых возможно в случае многобарьерного потенциала $\Phi(u)$ при наличии внешней силы или сил динамического трения, действующих на атомы плотноупакованного ряда в сложном кристалле. Необходимым условием, которое превращает частичный краудион в свободный устойчивый субкраудион, является баланс трех сил: внешней силы, силы трения и силы натяжения полуограниченного дефекта упаковки. Кратко обсуждена возможность наблюдения солитонов этого типа в экспериментах и отмечена их аналогия с доменными π -стенками, существующими в магнетиках в однородном внешнем магнитном поле.

Авторы выражают искреннюю признательность А. С. Ковалеву и М. М. Богдану за обсуждение затронутых в статье проблем и полезные критические замечания.

1. H. R. Paneth, *Phys. Rev.* **80**, 708 (1950).
2. Ж. Фридель, *Дислокации*, Москва, Мир (1967).
3. А. М. Косевич, *Теория кристаллической решетки*, Харьков, Вища школа (1988).
4. И. Ф. Люксов, А. Г. Наумов, В. Л. Покровский, *Двумерные кристаллы*, Киев, Наукова думка (1988).
5. Г. Кауш, *Разрушение полимеров*, Москва, Мир (1981).
6. В. Р. Регель, А. И. Слущер, Э. Е. Томашевский, *Кинетическая природа прочности твердых тел*, Москва, Наука (1974).
7. Я. И. Френкель, *Введение в теорию металлов*, Ленинград, Наука (1972).
8. O. M. Braun and Yu. S. Kivshar, *Phys. Rep.* **306**, 1 (1998).
9. В. Д. Нацик, Е. И. Назаренко, *ФНТ* **26**, 283 (2000).
10. *Солитоны в действии*, К. Лонгрен, Э. Скотт (ред.), Москва, Мир (1981).
11. *Солитоны*, Р. Буллаф, Ф. Кодри (ред.), Москва, Мир (1983).
12. Р. Додд, Дж. Эйблек, Дж. Гиббон, Х. Моррис, *Солитоны и нелинейные волновые уравнения*, Москва, Мир (1988).
13. P. Guyot and J. E. Dorn, *Canad. J. Phys.* **45**, 983 (1967).
14. А. М. Косевич, А. С. Ковалев, *Введение в нелинейную физическую механику*, Наукова думка, Киев (1989).
15. M. Peyrard and M. Remoissenet, *Phys. Rev.* **B26**, 2886 (1982).
16. M. Remoissenet and M. Peyrard, *Phys. Rev.* **B29**, 3153 (1984).
17. K. Maki and P. Kumar, *Phys. Rev.* **B14**, 118 (1976); *ibid*, 3920 (1976).
18. S. Burdick, M. El-Batanouny, and C. R. Willis, *Phys. Rev.* **B34**, 6575 (1986).
19. А. М. Косевич, А. С. Ковалев, *Теория динамического краудиона в трехмерной сильно анизотропной среде*, В сб.: *Динамика дислокаций*, Наукова думка, Киев (1975).

20. A. S. Kovalev, A. D. Kondratyuk, A. M. Kosevich, and A. I. Landau, *Phys. Rev.* **B48**, 4122 (1993); *Phys. Status Solidi B177*, 177 (1993).
21. A. I. Landau, A. S. Kovalev, and A. M. Kosevich, *Phys. Status Solidi B179*, 373 (1993).
22. M. M. Bogdan, A. M. Kosevich, and G. A. Maugin, *Cond. Matt. Phys.* **2**, 255 (1999).
23. О. К. Дудко, А. С. Ковалев, *ФНТ* **26**, 821 (2000).
24. А. Хуберт, *Теория доменных стенок в упорядоченных средах*, Москва, Мир (1977).
25. Дж. Хирт, И. Лоте, *Теория дислокаций*, Москва, Атомиздат (1972).
26. P. Tchofo Dinda and C. R. Willis, *Phys. Rev.* **E51**, 4958 (1995).
27. E. Kuramoto, Y. Aono, and T. Tsutsumi, *Crystal Res. Technol.* **19**, 331 (1984).
28. Б. В. Петухов, Ю. И. Поляков, *Кристаллография* **32**, 1324 (1987).
29. T. Suzuki, H. Koizumi, and H. O. K. Kirchner, *Acta Metall. Mater.* **43**, 2177 (1995).
30. А. Н. Диулин, Г. И. Кириченко, В. Д. Нацик, В. П. Солдатов, *ФНТ* **24**, 595 (1998).
31. Р. Курант, Д. Гильберт, *Методы математической физики*, Т. 1, Москва, Ленинград, Гостехтеориздат (1933).
32. Э. Маделунг, *Математический аппарат физики*, Москва, Физматгиз (1960).

Fractional and splitted crowdions in complicated crystal structures

V. D. Natsik, S. N. Smirnov, and Y. I. Nazarenko

The conditions of the existence and the features of the dynamics of crowdion excitations in crystals with a complicated structure of the potential crystal field forming crowdions in the closed-packed atomic rows are analyzed. The crystal matrix is assumed to be absolutely rigid and therefore the crowdion description reduces to the analysis of the generalized Frenkel–Kontorova model and the corresponding non-linear differential Klein–Gordon equation. In the framework of this model the cases of so-called double-well and double-barrier crystal potentials are studied: the structure of the subcrowdions with fractional topological charges, the structure of splitted perfect crowdions as well as the asymptotic dissociation of splitted crowdions into subcrowdions during transformation of the double-barrier potential into a double-well one are described. The conditions of the existence of special type subcrowdions associated with the atomic crystal viscosity and with the applied to crystal external forces are discussed. The qualitative analysis does not presuppose an exact solution of the nonlinear Klein–Gordon equation in the explicit form. The results of this analysis generalize the conclusions made in the studies of some particular cases of the exactly solvable Klein–Gordon equations with complicated potentials (see review article [8]). The findings of the work can be used not only in the crowdion physics but also in other fields of the nonlinear physics based on the Frenkel–Kontorova model.