

Особенности динамики одномерных дискретных систем с взаимодействием не только ближайших соседей и роль высшей дисперсии в солитонной динамике

А. М. Косевич, С. Е. Савотченко

Физико-технический институт низких температур им. Б. И. Веркина НАН Украины
Украина, 310164, г. Харьков, пр. Ленина, 47
E-mail: kosevich@ilt.kharkov.ua

Статья поступила в редакцию 12 февраля 1999 г.

Обсуждена роль взаимодействия не только ближайших соседей в атомной цепочке при изучении динамики как идеальной системы, так и системы с точечным дефектом. Построена функция Грина стационарных колебаний цепочки при всех частотах. Показано, что при учете взаимодействия со следующими за ближайшими соседями функция Грина неизбежно становится двупарциальной, причем характер ее двух составляющих существенно определяется собственной частотой. Выяснено, что частотам сплошного спектра малых колебаний отвечает функция Грина, имеющая одну составляющую типа плоской волны, а вторую — локализованную вблизи источника возмущения. Эта функция Грина описывает так называемые квазилокальные колебания. При определенных дискретных частотах, попадающих в сплошной спектр, квазилокальное колебание превращается в локальное (не распространяющееся на бесконечность). Проанализированы условия применимости дифференциальных уравнений с четвертой пространственной производной для описания длинноволновых колебаний атомной цепочки. Сформулированы соотношения между параметрами атомных взаимодействий, позволяющих использовать такие уравнения. Обсуждены асимптотики полей солитонов в нелинейной среде с пространственной дисперсией. Показано, что большинство параметров солитона определяется законом дисперсии линеаризованного уравнения.

Обговорено роль взаємодії не тільки найближчих сусідів в атомному ланцюжку при вивченні динаміки як ідеальної системи, так і системи з точковим дефектом. Побудовано функцію Гріна стаціонарних коливань ланцюжка при усіх частотах. Показано, що при урахуванні взаємодії з наступними за найближчими сусідами функція Гріна стає двопарціальною, причому характер її двох складових суттєво визначається власною частотою. Встановлено, що частотам суцільного спектра малих коливань відповідає функція Гріна, яка має одну складову типу плоскої хвилі, а другу — локалізовану поблизу джерела збурення. Така функція Гріна описує так звані квазілокальні коливання. При визначеннях дискретних частотах, що потрапляють до суцільного спектра, квазілокальне коливання перетворюється в локальне (яке не розповсюджується на нескінченість). Проаналізовано умови використання диференціальних рівнянь з четвертою просторовою похідною для опису довгих хвильових коливань атомного ланцюжка. Сформульовано співвідношення між параметрами атомних взаємодій, які дозволяють використовувати такі рівняння. Обговорено асимптотики полів солітонів в не лінійному середовищі з просторовою дисперсією. Показано, що більшість параметрів солітона визначається законом дисперсії лінеаризованого рівняння.

PACS: 68.65.+g, 43.25.+y

Введение

В последнее время при изучении нелинейной механики дискретных одномерных систем активно обсуждается вопрос о том, какие проявления дискретности находят основное отражение в соли-

тонной динамике [1]. Нелинейная динамика отдельного солитона в дискретной цепочке в значительной степени определяется пространственной структурой, приводящей к тому, что движущийся солитон испытывает воздействие определенного

эффективного потенциала. Для солитона в классической динамике этот потенциал порождает так называемую силу Пайерлса, а для солитона в квантовой динамике — зону свободного квазичастичного движения (см. [2]). Что же касается взаимодействия солитонов, возможности образования безызлучательных солитонных комплексов, характера убывания соответствующих полей, а также допустимых значений параметров солитона, то они в основном должны определяться законом дисперсии линеаризованных уравнений. Следовательно, на первом этапе исследований эти проблемы можно анализировать, используя линейные уравнения динамики, законы дисперсии которых с одинаковой легкостью находятся как в дискретной, так и в континуальной моделях. Это приводит к необходимости обсуждения некоторых соотношений между дискретностью механических систем и специфическими особенностями описывающих эти системы континуальных динамических уравнений.

Дискретность системы обуславливает отличие закона дисперсии малых колебаний от такового при континуальном описании распределенной одномерной системы. В длинноволновом приближении это отличие сводится к учету высшей дисперсии, т.е. к учету более высоких степеней волновых чисел k в разложении частоты ω (или энергии) по степеням ak , a — период дискретной структуры (постоянная решетки). В координатном представлении учет высшей дисперсии заключается в добавлении к обычным дифференциальным уравнениям математической физики пространственных производных, например, четвертого порядка.

Как известно, предельно длинноволновое описание механики дискретной системы, основанное на использовании дифференциальных уравнений с пространственными производными второго порядка, одинаково при учете любого числа взаимодействующих соседей. Поэтому подобное приближение вполне допустимо развивать на основе модели с взаимодействием только ближайших соседей, содержащей один параметр межчастичного взаимодействия. Если же целью исследования является изучение дополнительной высшей дисперсии, то последняя должна характеризоваться независимым параметром. Такой параметр можно «заработать» только путем учета взаимодействия не только ближайших соседей. В этом заключается причина, побудившая нас анализировать роль взаимодействия вторых соседей в кристаллической решетке.

Мы ограничимся обсуждением динамики одномерных систем, описываемых уравнениями, воз-

никающими при линеаризации в основном следующих двух уравнений в конечных разностях:

1) обобщение известного уравнения динамики дискретной атомной цепочки, приводящего к синусоидальному уравнению Гордона,

$$\frac{\partial^2 u_n}{\partial t^2} + \omega_0^2 \sin u_n + \alpha(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}) - \\ - \beta(2u_n - u_{n+2} - u_{n-2}) = 0 , \quad (1)$$

где α и β — константы взаимодействия с ближайшими и со вторыми соседями;

2) дискретный аналог нелинейного уравнения Шредингера (НУШ)

$$i \frac{\partial \psi_n}{\partial t} - E_0 \psi_n + |\psi_n|^2 \psi_n - \alpha'(2\psi_n - \psi_{n+1} - \psi_{n-1}) + \\ + \beta'(2\psi_n - \psi_{n+2} - \psi_{n-2}) = 0 , \quad (2)$$

где параметры α' и β' очевидным образом отличаются размерностью от им подобных в уравнении (1).

В разд. 1 изучена динамика системы, описываемой линеаризованным уравнением (1). Обращено внимание на то, что функция Грина такой системы всегда двупарциальная, т.е. состоит из двух независимых слагаемых. У функции Грина стационарных колебаний с частотами из сплошного спектра одно из слагаемых отвечает локализованным состояниям. Из этого следует, что типичное состояние изучаемой системы — это квазилокальное колебание. Двупарциальность функции Грина обуславливает любопытную особенность вынужденных колебаний системы. Возможны такие распределения вынуждающей гармонической силы с частотой, попадающей в сплошной спектр, которые порождают локализованные колебания. Это происходит за счет того, что интерференция расходящихся волн вдали от области приложения распределенной силы приводит к полному взаимному гашению этих волн.

В разд. 2 обсужден вывод континуальных динамических уравнений в длинноволновом приближении. Показано, что, в то время как дифференциальные уравнения с пространственными производными второго порядка всегда имеют область приложения в качестве длинноволнового приближения для дискретных уравнений, применимость уравнений с четвертыми пространственными производными ограничена жесткими требованиями к параметрам исходного уравнения. В частности, при описании стационарных колеба-

ний последовательное получение континуальных уравнений с пространственными производными четвертого порядка возможно при учете взаимодействия не только с ближайшими, но и по крайней мере со вторыми соседями в атомной цепочке.

На простом примере показано, что основные параметры солитонного решения НУШ (если последнее существует) определяются линеаризованным уравнением, независимо от структуры нелинейного слагаемого в уравнении.

1. Линейная динамика дискретной цепочки атомов

Функция Грина дискретной системы. В случае гармонических стационарных колебаний атомов $u_n(t) = u_n \exp(-i\omega t)$ линеаризованное уравнение (1) можно записать в виде

$$(\omega_0^2 - \omega^2)u_n + \alpha(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}) - \beta(2u_n - u_{n+2} - u_{n-2}) = 0. \quad (3)$$

Закон дисперсии этих колебаний, отвечающих решению $u_n = u_0 \exp(ikn)$, есть

$$\omega^2(k) = \omega_0^2 + 4\alpha \sin^2 \frac{k}{2} - 4\beta \sin^2 k, \quad (4)$$

где принято, что межатомное расстояние $a = 1$. Сплошной спектр колебаний представляет собой полосу частот $\omega_0 < \omega < \omega_m$, где $\omega_m^2 = \omega_0^2 + 4\alpha$.

Функция Грина уравнения стационарных колебаний бесконечной цепочки атомов в n -представлении равна

$$G_n(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{\omega^2 - \omega^2(k)}. \quad (5)$$

Особенности функции Грина определяются полюсами подынтегрального выражения на плоскости комплексного k , т.е. корнями характеристического уравнения

$$16\beta z^4 + 4s^2 z^2 + \omega_0^2 - \omega^2 = 0, \quad (6)$$

где $z = \sin(k/2)$ и $s^2 = \alpha - 4\beta$. Уравнение (6) имеет следующие корни:

$$z_{1,2}^2 = \frac{1}{8\beta} \left[-s^2 \pm \sqrt{s^4 - 4\beta(\omega_0^2 - \omega^2)} \right] \quad (7)$$

где индекс «1» соответствует знаку «+», а «2» – знаку «-». Будем считать, что $s^2 = \alpha - 4\beta > 0$.

Тип корней характеристического уравнения определяет вид функции Грина (5). В зависимости

от частотного диапазона колебаний корни (7) могут быть вещественными, комплексными или чисто мнимыми.

Изучим вначале особенности динамики цепочки в частотном диапазоне вне полосы сплошного спектра. Начнем с частот $\omega < \omega_0$. Такие частоты актуальны при описании динамики атомной цепочки при наличии дефекта или асимптотик полей солитонов типа бионов. В этом случае могут возникать локализованные колебания.

В интервале частот $\omega_c < \omega < \omega_0$, где $\omega_c^2 = \omega_0^2 - s^4/4\beta$, корни (7) будут чисто мнимыми:

$$z_j = i\zeta_j = i \operatorname{sh} \frac{\kappa_j}{2} \quad (j = 1, 2),$$

$$\zeta_{1,2}^2 = \frac{1}{8\beta} \left[s^2 \pm \sqrt{s^4 - 4\beta(\omega_0^2 - \omega^2)} \right]. \quad (8)$$

Нетрудно вычислить функцию Грина (5) для частот ниже полосы сплошного спектра в интервале $\omega_c < \omega < \omega_0$:

$$G_n(\omega) = \frac{1}{16\beta(\zeta_1^2 - \zeta_2^2)} \left\{ \frac{e^{-\kappa_1|n|}}{\zeta_1 (1 + \zeta_1^2)^{1/2}} - \frac{e^{-\kappa_2|n|}}{\zeta_2 (1 + \zeta_2^2)^{1/2}} \right\}, \quad (9)$$

где $\kappa_j = 2\operatorname{Arsh} \zeta_j$ ($j = 1, 2$) – параметры, которые характеризуют пространственные убывания амплитуд локальных колебаний при удалении от дефекта. Важно, что при учете вторых соседей в цепочке функция Грина становится двупарциальной, т.е. состоящей из двух по-разному экспоненциально убывающих парциальных слагаемых.

Заметим, что на предельной частоте, отвечающей нижнему краю сплошного спектра $\omega = \omega_0$, помимо однородного колебания с $\kappa_1 = 0$, единственного в случае чисто квадратичного закона дисперсии, может существовать неоднородное состояние с $\kappa_2 \neq 0$ ($\operatorname{sh}^2(\kappa_2/2) = s^2/4\beta$), поддерживаемое определенными граничными условиями. В частности, это означает, что допускается принципиальная возможность существования динамических солитонов нелинейных уравнений типа (1) или (2) даже с собственной частотой $\omega = \omega_0$.

При $\omega < \omega_c$ корни (8) становятся комплексными, т.е. $\kappa_{1,2} = \kappa \pm iq$, где κ и q определяются из соотношений

$$\operatorname{ch} \kappa \cos q = \frac{\alpha}{4\beta}, \quad \operatorname{sh} \kappa \sin q = \left(\frac{\omega_c^2 - \omega^2}{4\beta} \right)^{1/2}.$$

Начиная с частот, меньших ω_c , происходит переход от обычных локальных колебаний к

обобщенным локальным колебаниям. Под обобщенными понимают локальные колебания, амплитуда которых спадает осциллирующим образом при удалении от дефекта. Функцию Грина тогда можно записать в виде

$$G_n(\omega) = -\frac{\exp(-\kappa|n|) \sin(q|n| + \phi)}{(\omega_c^2 - \omega^2)^{1/2} (\omega_0^2 - \omega^2)^{1/4} (\omega_m^2 - \omega^2)^{1/4}}, \quad (10)$$

где фаза ϕ определяется соотношением

$$\operatorname{tg} 2\phi = \frac{\operatorname{sh} 2\kappa \sin 2q}{2(\operatorname{sh}^2 \kappa \cos^2 q - \operatorname{ch}^2 \kappa \sin^2 q)}. \quad (11)$$

Проанализируем теперь функцию Грина стационарных колебаний с частотами выше полосы сплошного спектра $\omega > \omega_m$. В этом диапазоне одно из волновых чисел комплексное ($k_1 = \pi + i\kappa_1$), а другое — чисто мнимое ($k_2 = i\kappa_2$). Тогда функция Грина равна

$$G_n(\omega) = \frac{1}{16\beta(\zeta_1^2 + \zeta_2^2)} \left\{ \frac{(-1)^n e^{-\kappa_1|n|}}{\zeta_1 (1 + \zeta_1^2)^{1/2}} + \frac{e^{-\kappa_2|n|}}{\zeta_2 (\zeta_2^2 - 1)^{1/2}} \right\}, \quad (12)$$

где $\zeta_1 = \operatorname{sh}(\kappa_1/2)$ и $\zeta_2 = \operatorname{ch}(\kappa_2/2)$, и параметры ζ_j ($j = 1, 2$) определяются соотношениями

$$\zeta_1^2 = \frac{1}{8\beta} \left\{ \sqrt{(\alpha + 4\beta)^2 + 4\beta(\omega^2 - \omega_m^2)} - \alpha - 4\beta \right\}, \quad (13)$$

$$\zeta_2^2 = \frac{1}{8\beta} \left\{ \sqrt{(\alpha + 4\beta)^2 + 4\beta(\omega^2 - \omega_m^2)} + \alpha + 4\beta \right\}. \quad (14)$$

При $\beta = 0$ второе слагаемое в (12) исчезает и функция Грина, естественно, совпадает с выражением для функции Грина дискретной цепочки с взаимодействием только ближайших соседей.

Обращает на себя внимание наличие второго слагаемого в (12), нетипичного для колебаний цепочки с взаимодействием только ближайших соседей (когда $\beta = 0$). Даже на предельной частоте, отвечающей верхнему краю сплошного спектра $\omega^2 = \omega_m^2 = \omega_0^2 + 4\alpha$, оно описывает неоднородные колебания, при которых соседние атомы колеблются в одной фазе.

Проблема собственных локальных колебаний цепочки с точечным дефектом. Рассмотрим гармонические колебания цепочки в присутствии точечного дефекта, который представляет собой изотопическую примесь в узле $n = 0$, т.е. будем считать, что в этом узле находится атом массой M , отличной от массы атомов m остальной цепоч-

ки. Тогда вместо (3) мы должны рассмотреть уравнение

$$(\omega_0^2 - \omega^2)u_n + \alpha(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}) - \beta(2u_n - u_{n+2} - u_{n-2}) = fu_n \delta_{n0}, \quad (15)$$

где параметр, который характеризует дефект, $f = (M - m)\omega^2/m$, а δ_{n0} — символ Кронекера. Формальное решение уравнения (15) можно записать с помощью функции Грина (5) в виде

$$u_n = -fu_0 G_n(\omega). \quad (16)$$

Дисперсионное соотношение, определяющее частоты локальных колебаний, можно получить из (16), положив $n = 0$ [3]:

$$1 + fG_0(\omega) = 0. \quad (17)$$

Тогда, используя функцию Грина (9), получим дисперсионное соотношение для локальных частот, если они попадают в интервал $\omega_c < \omega < \omega_0$:

$$f = 16\beta(\zeta_1^2 - \zeta_2^2) \left\{ \frac{\zeta_1 \zeta_2 \sqrt{1 + \zeta_1^2} \sqrt{1 + \zeta_2^2}}{\zeta_1 \sqrt{1 + \zeta_1^2} - \zeta_2 \sqrt{1 + \zeta_2^2}} \right\}, \quad (18)$$

где параметры ζ_j ($j = 1, 2$) определяются соотношениями (8).

В интервале частот $\omega < \omega_c$, воспользовавшись функцией Грина (10), дисперсионное соотношение для частот обобщенных локальных колебаний можно представить как

$$f \sin \phi = -(\omega_c^2 - \omega^2)^{1/2} (\omega_0^2 - \omega^2)^{1/4} (\omega_m^2 - \omega^2)^{1/4}. \quad (19)$$

Естественно, что локальные колебания с частотами ниже сплошного спектра могут возникать только при $f > 0$, т.е. при наличии тяжелой примеси.

Аналогично, подставив функцию Грина (12) в уравнение (17), можно получить дисперсионное соотношение для высокочастотных локальных колебаний:

$$f = -16\beta(\zeta_1^2 + \zeta_2^2) \left\{ \frac{\zeta_1 \zeta_2 \sqrt{1 + \zeta_1^2} \sqrt{\zeta_2^2 - 1}}{\zeta_1 \sqrt{1 + \zeta_1^2} + \zeta_2 \sqrt{\zeta_2^2 - 1}} \right\}, \quad (20)$$

где параметры ζ_j ($j = 1, 2$) определяются соотношениями (13) и (14).

Локальные колебания с частотами выше полосы сплошного спектра возникают при наличии легкой примеси (при $f < 0$).

Вынужденные локальные колебания. Предположим теперь, что на атомы в цепочке действуют

некоторые распределенные силы $F_n \exp(-i\omega t)$, локализованные вблизи $n = 0$. Тогда стационарное решение уравнений динамики цепочки можно записать с помощью функции Грина:

$$u_n = - \sum_{n'} G_{n-n'}(\omega) F_{n'} . \quad (21)$$

Допустим, что распределение сил имеет вид

$$F_n = (\delta_{0n} + \delta_{1n}) F , \quad (22)$$

т.е. к двум соседним узлам цепочки (например, $n = 0$ и $n = 1$) приложены осциллирующие с частотой $\omega \geq \omega_m$ внешние силы F , одинаковые по величине и направлению. Если частота ω совпадает с предельной частотой ω_m , то в цепочке может возникнуть локализованное колебание с однофазным движением всех атомов:

$$u_n = - \frac{F(1 + e^{\kappa_2})}{16\beta\zeta_2(\zeta_1^2 + \zeta_2^2)(\zeta_2^2 - 1)^{1/2}} e^{-\kappa_2 n} , \quad (23)$$

параметр κ_2 которого определяется из соотношения

$$\operatorname{sh}^2 \frac{\kappa_2}{2} = \frac{\alpha}{4\beta} . \quad (24)$$

Очевидно, имеются такие типы вынуждающей внешней силы, при действии которой «не работает» одно из слагаемых в (12). Рассмотрим, например, воздействие осциллирующих сил, приложенных к узлам $n = 0$ (сила F_0) и $n = \pm 1$ (сила F_1), т.е.

$$F_n = F_0 \delta_{0n} + F_1 (\delta_{1n} + \delta_{-1n}) . \quad (25)$$

Тогда из (21) при учете распределения сил (25) и функции Грина (12) следует решение

$$u_n = - \frac{1}{16\beta(\zeta_1^2 + \zeta_2^2)} \times \\ \times \left\{ \frac{(-1)^n (F_0 - 2F_1 \operatorname{ch} \kappa_1) e^{-\kappa_1 |n|}}{\zeta_1 (1 + \zeta_1^2)^{1/2}} + \frac{(F_0 + 2F_1 \operatorname{ch} \kappa_2) e^{-\kappa_2 |n|}}{\zeta_2 (\zeta_2^2 - 1)^{1/2}} \right\} . \quad (26)$$

Если силы F_0 и F_1 имеют разные знаки и $|F_0| > > 2|F_1|$, то существует такая частота ω , при которой

$$\operatorname{ch} \kappa_2 = \left| \frac{F_0}{2F_1} \right| . \quad (27)$$

Тогда выражение (26) упрощается:

$$u_n = \frac{(-1)^{n+1} 2F_1 (\operatorname{ch} \kappa_1 + \operatorname{ch} \kappa_2) e^{-\kappa_1 |n|}}{16\beta\zeta_1(\zeta_1^2 + \zeta_2^2) \sqrt{1 + \zeta_1^2}} . \quad (28)$$

Решение такого типа может описывать асимптотики солитона огибающей высокочастотных локализованных колебаний. Мы видим, что подобный солитон возможен при весьма специфических собственных частотах.

Если силы F_0 и F_1 имеют одинаковые знаки, то при некоторой частоте ω , определяемой из уравнения

$$\operatorname{ch} \kappa_1 = \frac{F_0}{2F_1} , \quad (29)$$

возникает локализованное колебание

$$u_n = - \frac{2F_1 (\operatorname{ch} \kappa_1 + \operatorname{ch} \kappa_2) e^{-\kappa_2 |n|}}{16\beta\zeta_2(\zeta_1^2 + \zeta_2^2) \sqrt{\zeta_2^2 - 1}} , \quad (30)$$

которое отвечает однофазному движению атомов.

Особенности колебаний с частотами внутри полосы сплошного спектра. Учет взаимодействия со вторыми соседями приводит к появлению дополнительных особенностей колебаний с частотами внутри полосы сплошного спектра $\omega_0 < \omega < \omega_m$. В этом случае возникают колебания, у которых одна мода локализована вблизи дефекта, а другая представляет собой стоячую волну. Такие колебания называют квазилокальными. Характеристическое уравнение (6) в рассматриваемом частотном диапазоне имеет два вещественных,

$$z_1^2 = \frac{1}{8\beta} \left[\sqrt{s^4 + 4\beta(\omega^2 - \omega_0^2)} - s^2 \right] , \quad (31)$$

и два мнимых корня,

$$\zeta_2^2 = \frac{1}{8\beta} \left[\sqrt{s^4 + 4\beta(\omega^2 - \omega_0^2)} + s^2 \right] . \quad (32)$$

Поэтому одно из волновых чисел $k_1 = 2\arcsin z_1$ будет вещественным, а другое — мнимым, $k_2 = ik_2$ ($\kappa_2 = 2\operatorname{Arsh} \zeta_2$).

Воспользовавшись выражениями (31) и (32), можно вычислить функцию Грина (5) в диапазоне частот квазилокальных стационарных колебаний:

$$G_n(\omega) = iB(\omega) e^{ik_1 |n|} + M(\omega) e^{-\kappa_2 |n|} , \quad (33)$$

где

$$B(\omega) = \left[16\beta z_1(z_1^2 + \zeta_2^2) \sqrt{1 - z_1^2} \right]^{-1} ,$$

$$M(\omega) = \left[16\beta\zeta_2(z_1^2 + \zeta_2^2) \sqrt{1 + \zeta_2^2} \right]^{-1}.$$

С помощью функции Грина (33) можно вычислить по известной формуле

$$g(\omega^2) = \frac{1}{\pi} \operatorname{Im} G_0(\omega)$$

плотность колебаний (распределение состояний по квадратам частот) цепочки без дефектов:

$$g(\omega^2) = \frac{1}{16\pi\beta(z_1^2 + \zeta_2^2)z_1 (1 - z_1^2)^{1/2}}. \quad (34)$$

Если имеется некоторое распределение сил F_n , то решение в области сплошного спектра может быть получено из (21) с помощью функции Грина (33):

$$u_n = \begin{cases} -iB(\omega)F^*(k_1)e^{-ik_1n} - M(\omega)Q(-\kappa_2)e^{-\kappa_2n}, & n < 0; \\ -iB(\omega)F(k_1)e^{ik_1n} - M(\omega)Q(\kappa_2)e^{-\kappa_2n}, & n > 0, \end{cases} \quad (35)$$

где $F(k) = \sum_n F_n e^{-ikn}$ и $Q(\kappa) = \sum_n F_n e^{\kappa_2n}$.

Предположим, что $F_n = F_{-n}$. Возможно такое симметричное распределение F_n , для которого при некотором k выполняется условие

$$F(k) = \sum_n F_n \cos kn = 0, \quad (36)$$

т.е. обращается в нуль компонента Фурье пространственного распределения сил. Тогда при соответствующей частоте ω , определяемой из условия (36), решение оказывается локализованным:

$$u_n = -M(\omega)Q(\kappa_2) e^{-\kappa_2|n|}, \quad (37)$$

где параметр κ_2 отвечает указанной частоте.

Таким образом, интерференция волн, возбужденных избранным распределением силы F_n , приводит к взаимному погашению колебаний вдали от области приложения таких сил. Другими словами, в сплошном спектре частот возникает локализованное состояние, чего невозможно ожидать в распределенной динамической системе с взаимодействием только ближайших соседей.

Допустим, что F_n имеет вид двугорбого распределения:

$$F_n = \phi(n - n_0) + \phi(n + n_0), \quad (38)$$

где $\phi(n) = \phi(-n)$ — четная функция. Тогда условие (36) выполняется для всех k , удовлетворяющих

условию $\cos kn_0 = 0$, т.е. для $k = (2p + 1)\pi/2n_0$, где $p = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm(n_0 - 1)$.

Даже не требуя четности $\phi(n)$, легко убедиться, что найдется хотя бы одно такое k , при котором условие (36) будет выполнено.

Мы видим, что существует дискретный набор частот, попадающих в сплошной спектр, для которых гармонически зависящая от времени сила с пространственным распределением (38) не вызывает излучения на бесконечности. Распределение типа (38) моделирует поведение нелинейного члена в (1) или в (2) в случае, если подобное уравнение имеет двухсолитонное решение. Если такое решение существует, то при некоторых частотах оно соответствует стационарному состоянию пары солитонов. Подобная ситуация обсуждалась в [4]. Подчеркнем, что принципиальная возможность существования подобного решения в сплошном спектре частот полностью обусловлена видом закона дисперсии малых колебаний.

Следует помнить, что описанные локализованные состояния принадлежат квазинепрерывному спектру атомной цепочки, а потому вес каждого из них очень мал и пропорционален $1/\sqrt{N}$, где N — число атомов в цепочке. Однако в нелинейной динамике вес подобных состояний может быть конечным.

Рассеяние волны точечным дефектом. Вернемся к случаю точечного изотоп-дефекта, когда $F_n = f\delta_{n_0} u_0$. Возможность получить явный вид функции Грина изучаемой системы позволяет легко обсудить задачу рассеяния собственно колебания идеальной цепочки точечным дефектом. Известно, что решение задачи рассеяния записывается в виде

$$u_n = u_0 e^{ik_1 n} + \chi_n, \quad (39)$$

поле χ_n может быть выражено через функцию Грина [2]:

$$\chi_n = -u_0 f \frac{G_n(\omega)}{D(\omega)}, \quad (40)$$

где $D(\omega) = 1 + fG_0(\omega)$. В решении (40) следует выбирать функцию Грина, соответствующую расходящимся на бесконечности волнам в виде (33). Тогда получим решение (39) в виде

$$u_n = \begin{cases} u_0 e^{ik_1 n} - \frac{u_0 f}{D(\omega)} [iB(\omega)e^{-ik_1 n} + M(\omega)e^{\kappa_2 n}], & n < 0, \\ u_0 e^{ik_1 n} - \frac{u_0 f}{D(\omega)} [iB(\omega)e^{ik_1 n} + M(\omega)e^{-\kappa_2 n}], & n > 0. \end{cases} \quad (41)$$

Любопытно заметить, что при выполнении условия

$$iB(\omega)f = D(\omega) \quad (42)$$

происходит полное отражение дефектом падающей волны и реализуется несимметричное состояние, которое соответствует стоячей волне, существующей только на одной из полуосей, и локализованным по обе стороны от дефекта модам:

$$u_n = \begin{cases} u_0 \left(2i \sin(k_1 n) - f \frac{M(\omega)}{D(\omega)} e^{\kappa_2 n} \right), & n < 0; \\ -u_0 f \frac{M(\omega)}{D(\omega)} e^{-\kappa_2 n}, & n > 0. \end{cases} \quad (43)$$

Из условия (42) следует, что несимметричные состояния (43) возможны при частотах, определяемых из соотношения

$$f = -16\beta\zeta_2 \sqrt{1 + \zeta_2^2} (z_1^2 + \zeta_2^2). \quad (44)$$

Возникновение такого вида несимметричных состояний (43) с частотами в сплошном спектре было обнаружено при рассмотрении задачи о расщеплении упругой волны плоским дефектом в изотропной среде [5]. Аналогичные особенности были отмечены в дискретной модели ГЦК кристалла в [6], где приведен анализ результатов численных расчетов. Однако следует помнить, что упругая волна состоит из двух независимых компонент (продольной и поперечной), а изучаемое нами поле является однокомпонентным. Следовательно, в нашем случае роль двух компонент исполняют два типа собственных колебаний, отвечающих разным корням характеристического уравнения.

По поводу веса состояния (43) мы можем повторить сказанное относительно решения (37).

2. Длинноволновые колебания системы с пространственной дисперсией

Линейные уравнения движения и функции Грина в континуальном приближении. Учет взаимодействия со вторыми соседями в дискретной цепочке оказывает существенное влияние на длинноволновые колебания при $k \ll 1$ (напомним, что $a = 1$). В этом пределе из дискретного уравнения (3) следует дифференциальное уравнение

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \omega_0^2 u - s^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + A^2 \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} = 0, \quad (45)$$

параметры которого связаны с константами взаимодействия первых и вторых соседей: $s^2 = \alpha - 4\beta$, $A^2 = (16\beta - \alpha)/12$. Будем считать, что выполняются условия $\alpha/16 < \beta < \alpha/4$.

Закон дисперсии стационарных колебаний системы без дефектов нетрудно получить либо из (45), либо из разложения закона дисперсии (4) дискретной модели с точностью до четвертых степеней по k :

$$\omega^2(k) = \omega_0^2 + s^2 k^2 + A^2 k^4. \quad (46)$$

Волновые числа k , отвечающие фиксированной частоте ω , можно определить из (46):

$$k_{1,2}^2 = \frac{1}{2A^2} \left[-s^2 \pm \sqrt{s^4 - 4A^2(\omega_0^2 - \omega^2)} \right], \quad (47)$$

где индекс «1» соответствует знаку «+», а «2» — знаку «-».

Поскольку в длинноволновом приближении для всех корней (47) должно выполняться требование $k_{1,2}^2 \ll 1$, приближение, основанное на (46), пригодно для описания стационарных колебаний дискретной цепочки лишь при частотах $|\omega_0 - \omega| \ll A$, если параметры цепочки удовлетворяют условию $s^2 \ll A^2$. Но в этом случае $A^2 \equiv \beta - s^2/12 \approx \beta$, и мы видим, что использование уравнения (45) оправданно только при учете вторых соседей.

Изучим особенности локализованных колебаний с частотами ниже сплошного спектра $\omega < \omega_0$. В частотном диапазоне $\omega_c < \omega < \omega_0$, где $\omega_c^2 = \omega_0^2 - s^4/4A^2$, волновые числа (47) являются чисто мнимыми, $k_j = i\kappa_j$ ($j = 1, 2$), и функция Грина уравнения (45) в рассматриваемом частотном диапазоне равна

$$G(x) = \frac{1}{2A^2(\kappa_1^2 - \kappa_2^2)} \left(\frac{e^{-\kappa_1|x|}}{\kappa_1} - \frac{e^{-\kappa_2|x|}}{\kappa_2} \right). \quad (48)$$

Функция Грина (48) является длинноволновым пределом функции (9) в предположении $\zeta_j = \kappa_j/2 \ll 1$ и $A^2 = \beta$. Мы еще раз убеждаемся, что учет дополнительной дисперсии в уравнении (45) приводит к согласованным результатам при $A^2 = \beta \gg s^2$.

В частотном диапазоне $\omega < \omega_c$ функция Грина в континуальном приближении естественным образом следует из дискретной функции Грина (10):

$$G(x) = -\frac{\sin(q|x| - \phi)}{2A^{1/2}(\omega_c^2 - \omega^2)^{1/2}(\omega_0^2 - \omega^2)^{1/4}}, \quad (49)$$

где

$$\kappa^2 = \frac{1}{4A^2} \left(2A \sqrt{\omega_0^2 - \omega^2} + s^2 \right)$$

и

$$q^2 = \frac{1}{4A^2} \left(2A \sqrt{\omega_0^2 - \omega^2} - s^2 \right),$$

а фаза колебаний ϕ задается соотношением $\operatorname{tg} \phi = \kappa/q$.

Обобщение формулы (49) на сферически симметричный случай трехмерной системы приведено в [7] (см. Приложение).

При частотах $\omega > \omega_0$ в сплошном спектре могут возникать квазилокальные колебания, так как один из корней (47) будет вещественным:

$$k^2 = \frac{1}{2A^2} \left[-s^2 + \sqrt{s^4 + 4A^2(\omega^2 - \omega_0^2)} \right], \quad (50)$$

а другой — мнимым:

$$\kappa^2 = \frac{1}{2A^2} \left[s^2 + \sqrt{s^4 + 4A^2(\omega^2 - \omega_0^2)} \right]. \quad (51)$$

Функция Грина в этом случае равна

$$G(x) = iB(\omega) e^{ik|x|} + M(\omega) e^{-\kappa|x|}, \quad (52)$$

$$B(\omega) = \left[2A^2 k(k^2 + \kappa^2) \right]^{-1}, \quad M(\omega) = \left[2A^2 \kappa(k^2 + \kappa^2) \right]^{-1}.$$

Функция Грина (52) демонстрирует свойства квазилокального колебания: она двупарциальная, причем одна ее порция локализована в пространстве, а вторая имеет вид стоячей волны во всем пространстве. Функция (52) отражает любопытную особенность физических свойств системы с описанной высшей дисперсией, а именно: наличие дополнительной пространственно локализованной компоненты поля (порции функции Грина), которая может проявляться в линейной цепочке с дефектами, а также в солитонных задачах нелинейной цепочки. Эта особенность допускает существование локализованных колебаний с частотами, принадлежащими сплошному спектру изучаемой цепочки. Условия реализации подобных состояний в распределенной системе аналогичны таковым для дискретной цепочки, полученным в разд. 1.

Проблема высокочастотных колебаний. Стандартный метод континуального описания высокочастотных ($|\omega - \omega_m| \ll \omega_m$) собственных колебаний дискретной цепочки сводится к введению огибающей тех атомных смещений, при которых соседние атомы колеблются в противофазе. Если записать решение уравнения (3) в виде

$$u_n = (-1)^n \Phi_n, \quad (53)$$

то в указанной области частот функция Φ_n будет слабо зависеть от n , и в континуальном приближении для нее получается следующее уравнение:

$$(\omega_m^2 - \omega^2)\Phi + s_1^2 \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + B^2 \frac{\partial^4 \Phi}{\partial x^4} = 0, \quad (54)$$

где $s_1^2 = \alpha + 4\beta$ и $B^2 = (\alpha + 16\beta)/12$. Ясно, что $\Phi(x)$ имеет смысл огибающей высокочастотных колебаний.

Отвечающий уравнению (54) закон дисперсии можно получить из (4), полагая $k = \pi + q$ и раскладывая (4) по малым q с точностью до четвертых степеней:

$$\omega^2(q) = \omega_m^2 - s_1^2 q^2 + B^2 q^4. \quad (55)$$

Ясно, что (55) следует непосредственно из (54) при подстановке $\Phi(x) = \Phi_0 \exp(iqx)$. Мы видим, что закон дисперсии вида (55) при больших q отвечает нефизическому поведению частот колебаний цепочки атомов вблизи верхнего края полосы сплошного спектра. Последнее слагаемое, пропорциональное q в четвертой степени, «портит» закон дисперсии. Следовательно, в этом случае необходимо ограничиваться лишь квадратичным приближением по q .

Поскольку мы приняли, что $\alpha > 4\beta > 0$, это означает, что включение четвертой производной в уравнение (54) для этой модели некорректно, и длинноволновое описание стационарных колебаний с частотой $\omega \approx \omega_m$ должно ограничиваться учетом второй пространственной производной в уравнении (54). Малым q отвечает условие $|\omega_m^2 - \omega^2| \ll \alpha$, которое и определяет область применимости дифференциального уравнения второго порядка для огибающей высокочастотных колебаний.

Роль высшей дисперсии в солитонной динамике. То обстоятельство, что асимптотика функции Грина (48) состоит из двух экспонент, позволяет сказать нечто о солитонных решениях соответствующего нелинейного уравнения, например уравнения (2). Перепишем это уравнение для стационарного решения $\Psi = z(x) \exp(-iEt)$ в безразмерном виде:

$$\frac{d^4 z}{dx^4} - \frac{d^2 z}{dx^2} + \Omega z = z^3, \quad (56)$$

содержащем только один параметр Ω , пропорциональный $E - E_0$.

Допустим, что (56) обладает четным солитонным решением $z(x) = \varphi_s(x) = \varphi_s(-x)$. Анализируя все члены в уравнении (56), получаем

$$\varphi_s(x) = \frac{M}{\operatorname{ch}^2 \kappa x}, \quad M = \text{const}. \quad (57)$$

Разложение (57) на бесконечности очевидно:

$$\varphi_s(x) = 4M \left(e^{-2\kappa|x|} - 2e^{-4\kappa|x|} \right). \quad (58)$$

Сравнивая показатели степеней в (58) и (48), в котором следует положить $A^2 = s^2 = 1$ и $\Omega = \omega_0^2 - \omega^2$, мы заключаем, что

$$\begin{aligned} 4\kappa^2 &= \kappa_1^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \sqrt{1 - 4\Omega} \right), \\ 16\kappa^2 &= \kappa_2^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 - 4\Omega} \right). \end{aligned} \quad (59)$$

Из (59) следует

$$\kappa^2 = 0,5 \quad \text{и} \quad \Omega = 0,16. \quad (60)$$

Таким образом, если солитонное решение нелинейного уравнения существует, то его основные параметры определяются линеаризованным уравнением. Само решение, естественно, находится из нелинейного уравнения (56). Решение (57) с параметрами (60) было впервые найдено в работе [8].

Анализ собственных колебаний среды с высшей дисперсией противоположного знака. Ситуация с использованием уравнения (45) изменяется, если $\beta < 0$. В этом случае $s^2 = \alpha + 4|\beta|$, $A^2 = -(|\beta| + s^2/12) < 0$ и сформулированное выше условие $|A^2| \gg s^2$ не может выполняться. Следовательно, линейное уравнение (45) непригодно для описания длинноволновых стационарных колебаний дискретной цепочки. Одна из причин этого заключается в нефизичности поведения закона дисперсии (46) с $A^2 < 0$ при больших k . В этом случае континуальное описание с помощью уравнения типа (45) допустимо только с использованием дифференциального уравнения с пространственной производной второго порядка.

Однако существует ситуация, в которой возможен континуальный эквивалент уравнения (3) при $\beta < 0$. Имеется в виду описание динамического возбуждения цепочки, стационарно перемещающейся со скоростью V , когда решение $u(x, t) = u(x - Vt)$. В этом случае вместо (45) появляется уравнение

$$\omega_0^2 u - \gamma^2 \frac{\partial^2 u}{dx^2} - B^2 \frac{\partial^4 u}{dx^4} = 0, \quad (61)$$

где $\gamma^2 = s^2 - V^2$, $s^2 = \alpha + 4|\beta|$ и $B^2 = (\alpha + 16|\beta|)/12$. Волновые числа k , отвечающие заданной скорости V , находятся из дисперсионного соотношения

$$\omega_0^2 + \gamma^2 k^2 - B^2 k^4 = 0 \quad (62)$$

и определяются выражениями

$$k_{1,2}^2 = \frac{1}{2B^2} \left(\gamma^2 \pm \sqrt{\gamma^4 + 4B^2 \omega_0^2} \right) \quad (63)$$

Видно, что условие длинноволновости $k \ll 1$ выполняется, если $\gamma^2 \ll B^2$ и $\omega_0^2 \ll B^2$.

Решение уравнения (61) по-прежнему двупарциальное: одна порция имеет вид плоской волны с квадратами волнового числа

$$k_1^2 = \frac{1}{2B^2} \left(\sqrt{\gamma^4 + 4B^2 \omega_0^2} + \gamma^2 \right), \quad (64)$$

а вторая — локализована, и коэффициент убывания ее амплитуды с расстоянием задается выражением

$$\kappa_2^2 = \frac{1}{2B^2} \left(\sqrt{\gamma^4 + 4B^2 \omega_0^2} - \gamma^2 \right). \quad (65)$$

Ясно, что вторая (локализованная) порция имеет физический смысл либо при наличии движущейся со скоростью V внешней приложенной к цепочке силы, либо при анализе асимптотик поля солитона, движущегося с указанной скоростью. Любопытно, что соотношения (64) и (65) имеют смысл как при $V < s$, так и при $V > s$, но непременно при условии $|\gamma^2| \ll B^2$. Что же касается необходимых условий, то они в принципе могут выполняться даже при $\beta = 0$. Другими словами, даже в случае цепочки с взаимодействием только ближайших соседей уравнение (61) имеет физический смысл при указанных условиях. Последнее обстоятельство оправдывает длинноволновое описание безызлучательного движения солитона в обобщенной модели Френкеля — Конторой [9, 10].

Ситуация с учетом высшей пространственной дисперсии в континуальном приближении при описании колебаний с частотами вблизи верхнего края полосы сплошного спектра также меняется, если $\beta < 0$. Полагая $k = \pi + q$ в (4) и раскладывая его по малым q , можно получить закон дисперсии

$$\omega^2(q) = \omega_m^2 - s^2 q^2 - C^2 q^4, \quad (66)$$

где $s^2 = \alpha - 4|\beta| > 0$ и $C^2 = (16|\beta| - \alpha)/12 > 0$. Отсюда определяются интересующие нас волновые числа:

$$q_{1,2}^2 = \frac{1}{2A^2} \left[-s^2 \pm \sqrt{s^4 - 4C^2(\omega^2 - \omega_m^2)} \right]. \quad (67)$$

Поскольку для всех корней (67) должно выполняться требование $q_{1,2}^2 \ll 1$, континуальное приближение, основанное на использовании высшей дисперсии в (66), пригодно для описания колебаний дискретной линейной цепочки атомов

при частотах $|\omega_p^2 - \omega^2| \ll C^2$, если выполняется условие $s^2 \ll C^2$. Следовательно, в этом случае в дифференциальном уравнении для огибающей высокочастотных колебаний целесообразно учитывать четвертую пространственную производную.

Авторы благодарны М. М. Богдану за плодотворное обсуждение работы в ходе ее выполнения. Исследования поддержаны проектом Министерства науки и технологий Украины (2.4/163).

Приложение

Обобщение функции Грина на трехмерный сферически симметричный случай

Обобщением уравнения (45) для модели трехмерной среды в континуальном приближении может служить уравнение [7]

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \omega_0^2 u - s^2 \Delta u + A^2 \Delta \Delta u = 0, \quad (\text{П.1})$$

где в сферически симметричном случае оператор Лапласа $\Delta = (1/r^2) \partial(r^2 \partial/\partial r)/\partial r$. Очевидно, гармонические решения уравнения (П.1) имеют закон дисперсии стационарных колебаний вида (46), где под k следует понимать модуль волнового вектора.

Функция Грина трехмерного кристалла равна

$$G(r) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{e^{ikr} d^3 k}{\omega^2 - \omega^2(k)}. \quad (\text{П.2})$$

Нетрудно вычислить функции Грина для стационарных колебаний с законом дисперсии (46) для различных частотных диапазонов.

При частотах ниже сплошного спектра $\omega_c < \omega < \omega_0$, где $\omega_c^2 = \omega_0^2 - s^4/4A^2$, волновые числа (47) являются чисто мнимыми, $k_j = ik_j$ ($j = 1, 2$), и функция Грина равна

$$G(r) = -\frac{1}{4\pi A^2} \frac{e^{-\kappa_1 r} - e^{-\kappa_2 r}}{(\kappa_1^2 - \kappa_2^2) r}. \quad (\text{П.3})$$

В случае $\omega < \omega_c$ волновые числа (47) становятся комплексными ($\kappa_{1,2} = \kappa \pm iq$) и

$$G(r) = \frac{1}{8\pi A^2} \frac{\sin(qr)}{qr} \frac{e^{-\kappa r}}{r}. \quad (\text{П.4})$$

При частотах сплошного спектра $\omega > \omega_0$ имеется одно вещественное волновое число k (50) и

одно чисто мнимое ik (51). Сферически симметричная функция Грина в этом случае имеет вид

$$G(r) = \frac{1}{4\pi A^2} \frac{e^{ikr} - e^{-\kappa r}}{(k^2 + \kappa^2) r}. \quad (\text{П.5})$$

С помощью (П.5) нетрудно вычислить плотность колебаний:

$$g(\omega^2) = \frac{1}{(2\pi)^2} \left\{ \frac{\sqrt{s^4 + 4A(\omega^2 - \omega_0^2)} - s^2}{2A^2[s^4 + 4A(\omega^2 - \omega_0^2)]} \right\}. \quad (\text{П.6})$$

Полученные функции Грина могут быть использованы при изучении колебаний кристалла с точечным дефектом.

1. S. Flach and C. Willis, *Phys. Rep.* **295**, 181 (1998).
2. А. М. Косевич, *Теория кристаллической решетки*, Вища школа, Харьков (1988).
3. I. M. Lifshitz and A. M. Kosevich, *Rep. Proc. Phys.* **19** (1966). (Рус. пер. И. М. Либшиц, А. М. Косевич, с. 142, в кн.: И. М. Либшиц, *Избранные труды*, Наука, Москва (1987)).
4. A. V. Buryak and N. N. Akhmediev, *Phys. Rev.* **E51**, 3572 (1995).
5. A. M. Kosevich and A. V. Tutov, *Phys. Lett.* **A248**, 271 (1998).
6. А. М. Косевич, Д. В. Мацокин, С. Е. Савотченко, *ФНТ* **25**, 63 (1999).
7. А. И. Буздин, В. Н. Меньшов, В. В. Тугушев, *ЖЭТФ* **91**, 2204 (1986).
8. A. Hook and M. Karlsson, *Opt. Lett.* **18**, 1390 (1993).
9. M. Bogdan and A. Kosevich, in: *Nonlinear Coherent Structures in Physics and Biology*, K. H. Spatschek and F. G. Mertens (eds.) Plenum Press, New York, 329, 373 (1994).
10. M. Bogdan and A. Kosevich, *Proc. Estonian Acad. Sci. Phys. Math.* **46**, 14 (1997).

Peculiarities of the dynamics of a one dimensional discrete systems with interaction of not only the nearest neighbors and the role of high dispersion in soliton dynamics

A. M. Kosevich and S. E. Savotchenko

Effect of interaction of not only nearest neighbors on dynamics of both perfect systems and systems with point defects is analyzed. The Green functions for stationary vibrations of the chain for every frequency are constructed. It is shown that the Green function becomes bipartial with taking into account the interaction with nearest neighbors, and the character of these two components is determined essentially by the self frequency. The Green function for the continuous spectrum of small vibrations has got one component of a standing wave type and

another of a wave localized near the perturbation source. Such Green function describe so-called quasi-localized vibrations. It is found that there are special discrete frequencies inside the continuous spectrum for which the quasi-localized vibrations transform into localized ones (not existing to infinity). The conditions under which the differential equations with the fourth spatial derivative may be applied to

describe the long-wave vibrations of the atomic chain are considered. Relations between the atomic parameters that permit the application of such equations are formulated. The asymptotics of soliton fields in a nonlinear medium with a spatial dispersion are discussed. The majority of the soliton parameters are shown to be determined by the dispersion relation of the linearized equation.