

Солитоны сжатия двух типов в кристаллах с межатомным потенциалом взаимодействия Леннарда–Джонса

О. А. Дубовский¹⁾, А. В. Орлов

Государственный научный центр Российской Федерации Физико-энергетический институт им. А.И. Лейпунского
249033 Обнинск, Калужская обл., Россия

Поступила в редакцию 26 февраля 2008 г.

Показано, что в кристаллах с межатомным потенциалом взаимодействия Леннарда–Джонса генерируются солитонные волны сжатия с одним и двумя максимумами в плотности. Используется оригинальная процедура восстановления амплитудной зависимости волн, стартующая с низкоамплитудных крыльев солитонов, где для неоднородных волн применимо гармоническое приближение.

PACS: 05.45.–a

Развитие процессов реструктуризации и разрушения кристаллических материалов при высоких динамических и температурных нагрузках определяется на ранней подпороговой стадии нелинейной микродинамикой высокоамплитудных решеточных колебаний с предельно большими подпороговыми амплитудами. Так, в гидридах переходных металлов высокочастотные колебания имеют широкий спектральный диапазон от предельных однофононных энергий ~ 150 мэВ до мультифононных в инфракрасной (ИК) области энергий диффузионных порогов уже кинетических процессов ~ 700 мэВ [1]. В экспериментальных спектрах в ИК области выделяются узкие резонансы, отвечающие в квантовой теории связанным бифононам, трифононам и т.д. [2, 3]. Согласование с классической теорией нелинейных солитонных волн как мультифононных комплексов проводилось в [4, 5]. При исследовании солитонов обычно использовались модельные потенциалы с асимптотиками, неточными при предельно больших и предельно малых межатомных расстояниях [6–10]. Так, в расчетах, приводящих в рамках континуального приближения к уравнению Кортевега де Вриза (КдВ) и соответствующему солитонному решению в кристалле с условно фиксированным равновесным положением атомов, в потенциале межатомного взаимодействия наряду с квадратичными составляющими по смещениям атомов из равновесных положений учитывались ангармонические составляющие только 3 и 4 порядков [7]. Точное аналитическое солитонное решение Тода [9] для кристаллической решетки получено при потенциале, который при смещениях от условно фиксированных равновесных положений линейно возрастает при больших межатомных расстояниях и конечен при ну-

левом межатомном расстоянии. Такие явно нефизические асимптотики модельных потенциалов снижают возможность применения этих потенциалов при исследовании процессов реструктуризации и разрушения материалов областью только малых смещений, в то время как при исследовании ранней стадии процессов реструктуризации и разрушения необходимо учитывать нелинейные колебания и с предельно большой подпороговой амплитудой, и с предельным сжатием. В отличие от потенциалов такого типа потенциал Леннарда–Джонса (ЛД) имеет точные соответствующие асимптотики при больших и малых межатомных расстояниях с естественным определением равновесных положений атомов в узлах кристаллической решетки, однако для него ранее не исследовалась возможность генерации солитонов. При исследовании нелинейных колебаний используется несколько достаточно сложных аналитических и численных методов решения систем соответствующих нелинейных уравнений, в частности, метод обратной задачи и др. [7], и эти методы в последующем могут быть применены и при исследовании солитонов в решетке с потенциалом ЛД.

В настоящей работе предложен и апробирован дополнительный простой и эффективный метод численного решения соответствующей системы нелинейных динамических уравнений, стартующий с соответствующего аналитического решения, и этот метод позволил определить точную амплитудную зависимость солитона сжатия для потенциала ЛД. Метод определения амплитудной зависимости солитона заключается в следующем. На крыльях солитонов амплитуды колебаний предельно малы и, следовательно, применимо гармоническое приближение. Для пространственно-временных зависимостей на крыльях используются экспоненциально затухающие реше-

¹⁾e-mail: dubov@ippe.ru

ния гармонического приближения для неоднородных волн с постоянным для гармонического приближения мультипликативным фактором. Далее, начиная с крыльев, с использованием оригинального алгоритма, инвертированного по сравнению с обычными схемами, восстанавливается вся амплитудная зависимость солитона. Последующее варьирование указанного мультипликативного фактора на крыльях позволило получить точную форму солитона стандартного вида с одним максимумом плотности при потенциале ЛД. Более того, этот метод позволил обнаружить солитонные волны нового типа – солитоны сжатия с тонкой структурой амплитудной зависимости в центральной части солитона – двумя максимумами и промежуточным минимумом в плотности. Аналогами являются “двойные кинки” двойного \sin -Гордон уравнения и солитонное решение комбинации КдФ и МКдФ с двумя максимумами [7]. В определенном приближении можно этот тип солитона называть бисолитоном. По общему виду второй из найденных солитонов аналогичен “кратерному” солитону, найденному ранее при исследовании нелинейных колебаний в кристаллах с ферми-резонансом оптических колебаний [10, 11]. Можно ожидать, что дальнейшие исследования нелинейных солитонных волн в кристаллах с реальным потенциалом атом-атомного взаимодействия ЛД позволят найти целую иерархию солитонных волн различного топологического типа, аналогичную той, которая была обнаружена ранее в [10, 11].

В рамках классической скалярной микротехники рассмотрим 1D моноатомный кристалл с потенциалом ЛД V_{nm} взаимодействия атомов с массой M в узлах n и m ($n, m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) с координатами X_n, X_m :

$$V_{nm} = \varepsilon \left[\left(\frac{R_0}{R_{nm}} \right)^{12} - \left(\frac{R_0}{R_{nm}} \right)^6 \right],$$

$$R_{nm} = X_m - X_n, \quad n > m. \quad (1)$$

В (1) ε – параметр, определяющий нижайшую энергию $V_0 = -0.25\varepsilon$ связанного состояния двух изолированных атомов, и R_0 определяет равновесное межатомное расстояние $R_s = 2^{1/6}R_0$. Будем полагать, что в кристалле взаимодействуют ближайшие атомы, отметив, что взаимодействие с более далекими атомами при фиксированном наиболее далеком атоме может быть непосредственно учтено в рамках не принципиальной модификации схемы расчетов, представленной ниже. В нижайшем по энергии равновесном состоянии атомы расположены в узлах кристаллической решетки с координатами $X_n^0 = nR_s$,

$n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Динамические уравнения движения атомов имеют следующий вид:

$$M \frac{d^2 X_n}{dt^2} = \Psi(X_n - X_{n-1}) - \Psi(X_{n+1} - X_n), \quad (2)$$

$$\Psi(X) \equiv \varepsilon(12R_0^{12}X^{-13} - 6R_0^6X^{-7}).$$

Введя безразмерные переменные $r_n \equiv (X_n - X_{n-1})/R_0$ и $\tau = t\sqrt{\varepsilon/MR_0^2}$, получаем соответствующее динамическое уравнение для разностей r_n :

$$\frac{d^2 r_n}{d\tau^2} = 2\psi(r_n) - \psi(r_{n-1}) - \psi(r_{n+1}),$$

$$\psi(r) \equiv 12r^{-13} - 6r^{-7}. \quad (3)$$

В равновесном положении $r_n = r^{(0)} = 2^{1/6}$. При малых отклонениях от положения равновесия с $r_n = r^{(0)} + \delta r_n$ и $\delta r_n \ll r^{(0)}$ с помощью соответствующего разложения получаем систему линейных уравнений для δr_n :

$$d^2 \delta r_n / d\tau^2 = 18(r^{(0)})^{-2}(\delta r_{n+1} + \delta r_{n-1} - 2\delta r_n). \quad (4)$$

Из (4) для однофононных малоамплитудных колебаний с пространственно-временной зависимостью $\delta r_n \approx \exp(i(Kn - \Omega\tau))$ получаем дисперсионную зависимость фононов $\Omega = \Omega_K = 12(r^{(0)})^{-4} \sin(K/2)$ с соответствующей фазовой скоростью Ω_K/K . Отметим, однако, что существуют решения (4) с пространственной зависимостью $\delta r_n = A \exp(\pm kn \mp \nu\tau)$, отвечающие мнимым частотам и волновым векторам для неоднородных волн. При этом для линейных колебаний величина A – произвольная постоянная. Аналогом дисперсионной зависимости является следующее из (4) соотношение между k и ν :

$$\nu = 12(r^{(0)})^{-4} \text{sh}(k/2). \quad (5)$$

На крыле солитона при $\tau \rightarrow -\infty$ именно такой асимптотический вид имеют солитоны и Тода, и КдВ [7–9]. Естественно, крылья солитона смещаются с той же скоростью $c = \nu/k$, что и центральная часть солитона, как единого целого. Таким образом, крыло солитона имеет указанное экспоненциальное понижение, однако константа A для известных точных аналитических решений является вполне определенной фиксированной величиной [7–9]. В дальнейшем мы с помощью указанного ниже инвертированного алгоритма восстановим всю амплитудную зависимость солитона, стартуя из области экспоненциально малого крыла с константой A при $\tau \rightarrow -\infty$ с проходом центра солитона при $\nu\tau = kn$. Последующее варьирование величины позволяет выделить то точное значение $A = A_c$, при котором в центре солитона наблюдается соответствующий экстремум с нулевой производной. При отклонении в определенном диапазоне

величины A от этого точного значения A_c экстремума в центре нет и солитонное решение отсутствует. При более высоких значениях A аналогичным образом фиксировался солитон с двумя максимумами.

Солитонным решением системы уравнений (3) является функция $\rho(\tau - (n/c)) \equiv r_n(\tau)$. Вследствие трансляционной инвариантности мы можем ограничиться уравнением (3) с $n = 0$, которое имеет вид

$$d^2\rho/d\tau^2 = 2\psi(\rho(\tau)) - \psi(\rho(\tau - 1/c)) - \psi(\rho(\tau + 1/c)). \quad (6)$$

Это уравнение в правой части включает смещения по времени в обоих направлениях, так называемые запаздывающие и опережающие члены. В стандартных алгоритмах для дифференциальных уравнений второго порядка без смещений по времени в правой части численное решение производится при разложении производной на соответствующей временной сетке и определении каждого последующего значения функции в очередном узле сетки из значений правой части уравнения и функции на двух предыдущих узлах сетки. В данном случае уравнения (6), более высокого класса сложности, эта схема неприменима, так как в правой части представлены конечные временные смещения в двух направлениях. Это уравнение с запаздывающими и опережающими членами в правой части вполне аналогично соответствующим уравнениям для оптических поляритонных возбуждений, формирующихся именно вследствие запаздывающего взаимодействия дипольных осцилляторов, генерирующих сферические электромагнитные волны [12, 13]. Для решения (6) представим это уравнение в инвертированном виде со смещенным временем $\tilde{\tau} = \tau + (1/c)$:

$$\psi(\rho(\tilde{\tau})) = - \left(\frac{d^2\rho}{d\tau^2} \right)_{\tau=\tilde{\tau}-(1/c)} + \\ + 2\psi(\rho(\tau))_{\tau=\tilde{\tau}-(1/c)} - \psi(\rho(\tau))_{\tau=\tilde{\tau}-(2/c)}. \quad (7)$$

Это соотношение является фактически уравнением вида $\psi(\rho) = F$ для $\rho(\tilde{\tau})$, если известны входящие в правую часть (7) величины ρ и вторая производная в предыдущие моменты времени $\tilde{\tau} - (1/c)$ и $\tilde{\tau} - (2/c)$. Разделим каждый временной промежуток длины $(1/c)$ на достаточно большое число N_m равных частей. Сплошная нумерация моментов времени $i = 0, 1, 2, \dots, N$ во временной сетке с $N + 1$ узлом при $N > N_m$ проводится через каждый временной интервал $\delta\tau = 1/N_m c$ со стартом из достаточно удаленной от центра солитона точки $\tau_i = \delta\tau(i - N)$, $i = 0, 1, 2, \dots, N$. При достаточно большом N_m вторая производная в (7) стандартным образом может быть

представлена в виде $(d^2\rho/d\tau^2)_i = (\delta\tau)^{-2}(\rho_{i+1} + \rho_{i-1} - 2\rho_i)$. В результате алгоритм определения значений ρ_i по значениям этой же величины в предыдущие моменты времени имеет следующий вид:

$$\psi(\rho_i) = -(\delta\tau)^{-2}(\rho_{i-m+1} + \rho_{i-m-1} - 2\rho_{i-m}) + \\ + 2\psi(\rho_{i-m}) - \psi(\rho_{i-2m}), \quad (8)$$

и ρ_i в левой части на каждом этапе должен определяться из решения этого уравнения при известной правой части и аналитической зависимости $\psi(\rho)$ в (3).

Первоначально рассмотренная выше процедура расчета тестировалась на известном точном аналитическом солитонном решении при потенциале Тода. В этом случае в безразмерном представлении, аналогичном указанному выше, при соответствующем определении некоторых несущественных постоянных и без фиксации равновесного положения потенциал Тода динамические уравнения и их солитонное решение имеют следующий вид [9]:

$$V(r) = \exp(-r) + r,$$

$$\frac{d^2r_n}{d\tau^2} = 2 \exp(-r_n) - \exp(-r_{n+1}) - \exp(-r_{n-1}), \quad (9)$$

$$r_n = -\ln \left(1 + \frac{\text{sh}^2(\kappa)}{\text{ch}^2(\kappa n - \tau \text{sh}(\kappa))} \right).$$

Сравнение с (3) показывает, что в данном случае функция ψ имеет вид $\psi = \psi_T(r) = \exp(-r)$. В этом случае определение $\rho - i$ в левой части (7), то есть решение уравнения $\psi(\rho) = F$, имеет вид $\rho = -\ln(F)$, и весь алгоритм (7) может быть представлен следующим образом:

$$\rho_i = -\ln[-(\delta\tau)^{-2}(\rho_{i-m-1} + \rho_{i-m+1} - 2\rho_{i-m}) + \\ + 2 \exp(-\rho_{i-m}) - \exp(-\rho_{i-2m})]. \quad (10)$$

Нетрудно видеть из точного решения Тода (9), что на крыле солитона при $\kappa n - \tau \text{sh}(\kappa) \rightarrow -\infty$ величина $r_n \approx -4\text{sh}^2(\kappa) \exp[2(\kappa n - \tau \text{sh}(\kappa))]$, что при соответствующем обозначении $k = 2\kappa$, $\nu = 2\text{sh}(\kappa)$ совпадает с использованной асимптотикой. При этом использованная выше константа A в точном решении равна величине $A = A_0 = -4\text{sh}^2(k/2)$.

При расчете амплитудной зависимости солитонов с потенциалом ЛД начальные стартовые значения выбирались, как указано выше, в виде $\rho_i = r^{(0)} + A \exp(\nu \delta\tau(i - N))$ при $i = 0, 1, 2, \dots, 2N_m$. Начиная с $i = 2N_m + 1$, в правую часть (8) подставлялись предыдущие значения $\rho_{j < i}$, и из решения этого

уравнения с зависимостью ψ из (3) определялась величина ρ_i . Последующими итерациями определялась вся зависимость $\rho(\tau)$.

На рис.1 представлены три зависимости $\rho(\tau)$, полученные при тестировании метода на точном ана-

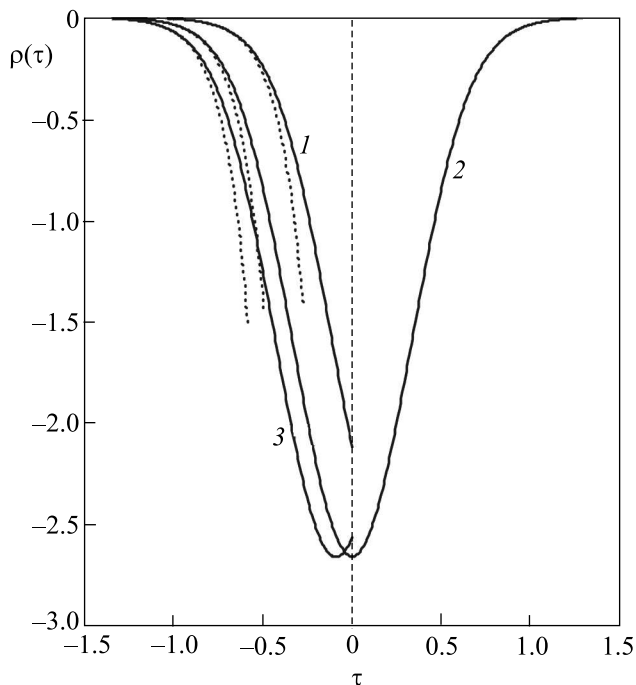


Рис.1. Зависимость $\rho(\tau)$ для солитонов Тода, тестируемая предложенным методом

литическом решении Тода. Расчеты проводились при значениях $N = 8 \cdot 10^3$, $N_m = 2 \cdot 10^3$ величинах $l = 4.0$, $\nu = 7.25$, $c = 1.81$ и следующих трех значениях константы A : $A = A_0 = -52.6$ (кривая 1); $A = 0.2A_0$ (кривая 2); $A = 2.0A_0$ (кривая 3), то есть при точном совпадении с аналитическим решением, с величиной A , меньшей и большей этого точного значения. Штриховые линии представляют продолжения стартовых экспоненциальных кривых, от которых отрываются точные решения, полученные с использованием указанного алгоритма. При использовании разностных схем с соответствующей заменой второй производной, как обычно, возникают определенные флуктуации функциональной зависимости, тем меньшие, чем меньше шаг временной сетки и более точна эта замена. При тестировании на солитоне Тода при данных значениях N , N_m и старте с $\tau \rightarrow -\infty$ эти флуктуации наблюдались только на дальнем краю противоположного крыла $\tau \rightarrow +\infty$, гораздо позже прохождения центра солитона. Такие флуктуации во всех расчетах были несущественны, и при получении всех представленных ниже рисун-

ков использовались стандартные программы сглаживания. Кривая 1, полученная при использовании указанного алгоритма при $A = A_c = A_0$, точно совпадает с аналитической зависимостью солитонного решения, представленного в (9). Видно, что при отклонении величины A от точного значения A_0 в обе стороны функция $\rho(\tau)$ при $\tau = 0$ имеет ненулевые производные, что и используется как критерий получения точного решения.

На рис.2 представлены полученные с использованием указанного метода солитонные решения

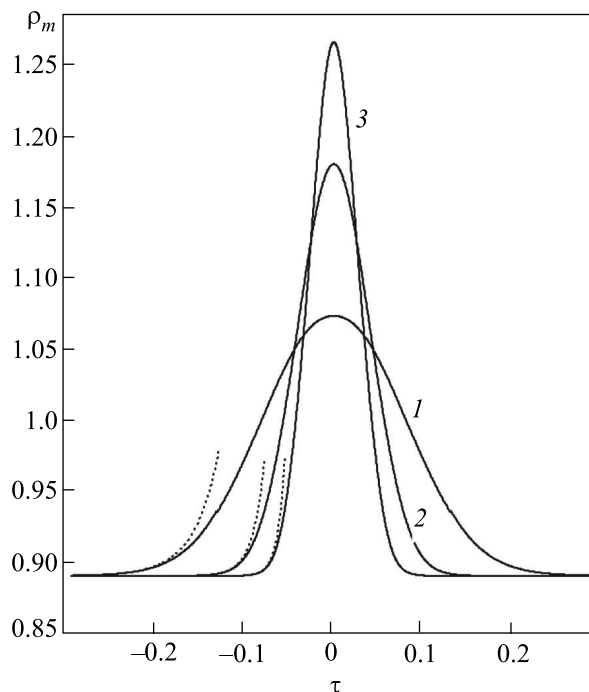


Рис.2. Солитон с одним максимумом плотности в кристалле с потенциалом ЛД

для кристалла с атом-атомным потенциалом ЛД. Представлена зависимость от τ плотности $\rho_m(\tau) = [\rho(\tau)]^{-1}$. Кривая 1 отвечает значениям $k = 4.5$, $A_c = 0.095A_0$, кривая 2 – значениям $k = 6.0$, $A_c = 0.07A_0$ и кривая 3 – значениям $k = 7.0$, $A_c = 0.068A_0$ при величинах $N = 8 \cdot 10^3$, $N_m = 2 \cdot 10^3$. Видно, что при увеличении k пространственная область отклонения атом-атомных расстояний от равновесного значения уменьшается, величина отклонения от равновесного значения в этой области сжатия возрастает и межатомные расстояния в этой области существенно меньше равновесных значений, а плотность выше. Из этих данных величин A_c видно, что, по сравнению с солитоном Тода, крылья в солитоне ЛД существенно меньше отклоняются от равновесных значений, особенно при больших k .

На рис.3 представлены решения нового типа, обнаруженные при применении указанной процедуры

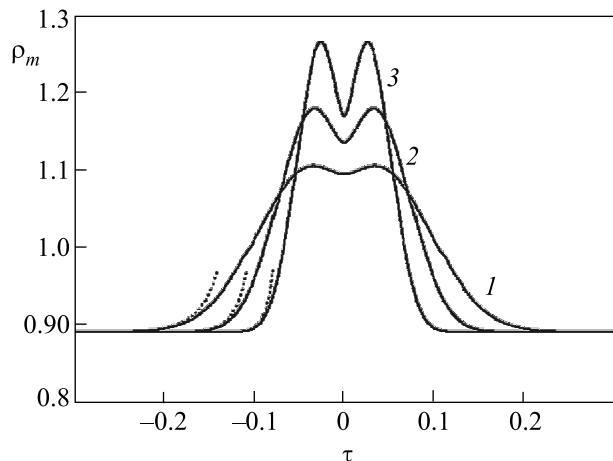


Рис.3. Солитон с двумя максимумами плотности в кристалле с потенциалом ЛД

при более высоких значениях A . Кривая 1 отвечает значениям $k = 5.0$, $A_c = 0.39A_0$, кривая 2 – значениям $k = 6.0$, $A_c = 0.87A_0$ и кривая 3 – значениям $k = 7.0$, $A_c = 1.75A_0$ при значениях $N = 8 \cdot 10^3$, $N_m = 2 \cdot 10^3$. Из этих данных величин A_c видно, что в отличие от солитонов, представленных на рис.2, для этих решений с ростом k крылья плотности относительно солитона Тода, наоборот, понижаются. В центральной части представленных кривых наблюдается тонкая структура из двух локальных максимумов. На рис.3 видно, что для этой волны при увеличении k , как и для солитона первого типа, наблюдается сужение солитона и уменьшение в экстремуме отклонения от равновесной плотности. Общий вид найденного солитона второго типа аналогичен “кратерному” солитону, найденному авторами ранее при исследовании нелинейных колебаний в кристаллах с фермирезонансом оптических колебаний [10, 11]. Поэтому

можно ожидать, что дальнейшие исследования нелинейных солитонных волн в кристаллах с реальным потенциалом атом-атомного взаимодействия ЛД позволят при использовании данного алгоритма найти целую иерархию солитонных волн различного топологического типа, таких как “стайки волн” [7], и вполне аналогичную той, которая была ранее обнаружена в [10, 11].

В заключение авторы выражают признательность В.М. Аграновичу и А.М. Камчатнову за полезные замечания. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и Калужского научного центра Администрации Калужской области (грант # 07-02-96404).

1. S. Ikeda and N. Watanabe, J. Phys. Soc. Japan. **56**, 2 565 (1987).
2. V. M. Agranovich, O. A. Dubovsky, and A. V. Orlov, Phys. Lett. A **119**, 83 (1986).
3. V. M. Agranovich and O. A. Dubovsky, *Optical properties of mixed crystals*, North – Holland, Amsterdam, 1988, p. 83.
4. А. Н. Ораевский, М. Ю. Судаков, ЖЭТФ **94**, 283 (1988).
5. G. D. Mahan, Phys. Rev. B **72**, 144302 (2005).
6. G. D. Mahan, Phys. Rev. B **74**, 094304 (2006).
7. Р. Додд, Дж. Эйлбек, Дж. Гиббон, Х. Моррис, *Солитоны и нелинейные волновые уравнения*, М.: Мир, 1988.
8. Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Физическая кинетика*, М.: Наука, 1979.
9. М. Тога, *Теория нелинейных решеток*, М.: Мир, 1984.
10. V. M. Agranovich, O. A. Dubovsky, A. M. Kamchatnov, and P. Reineker, Mol. Cryst. Liq. Cryst. **355**, 25 (2000).
11. О. А. Дубовский, А. В. Орлов, ФТТ **38**, 1221 (1996).
12. О. А. Дубовский, ЖЭТФ **125**, 272 (2004).
13. О. А. Дубовский, Письма в ЖЭТФ **81**, 603 (2005).