

## ЛОКАЛИЗОВАННЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ ОДНОРОДНЫХ АНГАРМОНИЧЕСКИХ РЕШЕТОК

*В.М.Бурлаков, С.А.Киселев, В.И.Рупасов*

Установлено, что предсказанные ранее теоретически<sup>1-3</sup> и обнаруженные в численном эксперименте<sup>4</sup> собственные локальные и резонансные колебания (СЛК и СРК) в ангармонической решетке генеалогически связаны с солитонами огибающей. Обнаружена неустойчивость однородного возбуждения решетки относительно распада на СЛК.

В 1988 году Сиверсом и Такено<sup>1-3</sup> было замечено, что в однородных решетках с квартичным ангармонизмом в потенциале взаимодействия частиц могут существовать собственные локальные или резонансные (в зависимости от знака константы ангармонизма) колебания (соответственно СЛК или СРК). Исследования в<sup>1-3, 5</sup> были проведены в пределе сильного ангармонизма, когда характерная частота СЛК  $\omega_l \gg \omega_m$  или СРК  $-\omega_r \ll \omega_m$  ( $\omega_m$  – верхняя граница фононного спектра), поэтому осталась неясной связь обнаруженных локализованных возбуждений с хорошо уже исследованными ранее – солитонами. Разрешение этого вопроса и было целью обсуждаемых ниже исследований.

1. Для выяснения генеалогии СЛК и СРК рассмотрим движение частиц массы  $m$  одноатомной ангармонической цепочки, описывающееся уравнением

$$m\ddot{u}_n = K_2(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) + K_4((u_{n+1} - u_n)^3 + (u_{n-1} - u_n)^3). \quad (1)$$

где  $u_n$  – смещение  $n$ -ого атома из положения равновесия,  $K_2$  и  $K_4$  – гармоническая и ангармоническая константы потенциала.

Предполагая спектр колебаний частицы в СЛК гармоническим, будем искать решение уравнений (1) в виде:

$$u_n = \xi_n \cdot \exp(-i\omega t + ikx) + \xi_n^* \exp(i\omega t - ikx). \quad (2)$$

где  $\xi_n$  – медленная амплитуда колебания. Подставляя (2) в (1) и усредняя по периоду  $2\pi/\omega$  высокочастотные гармоники получаем уравнения

$$\left. \begin{aligned} & \frac{8i\omega}{\omega_m^2} \xi_n + \xi_{n+1} \exp(ikh) + \xi_{n-1} \exp(-ikh) + \left( \frac{4\omega^2}{\omega_m^2} - 2 \right) \xi_n + \\ & + 3\lambda \left( (\xi_{n+1} \exp(ikh) - \xi_n) | \xi_{n+1} \exp(ikh) - \xi_n |^2 + \right. \\ & \left. + (\xi_{n-1} \exp(-ikh) - \xi_n) | \xi_{n-1} \exp(-ikh) - \xi_n |^2 \right) = 0, \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

где  $\omega_m = (4K_2/m)^{1/2}$  – частота края зоны фононов,  $\lambda = K_4/K_2$  – параметр ангармонизма,  $h$  – постоянная решетки. Предполагая близость  $\omega$  к краю фононной зоны ( $\omega = \omega_m + \Delta\omega$ , где  $|\Delta\omega| \ll \omega_m$ ), малость  $\lambda$ , а также плавный характер изменения  $\xi_n$  вдоль цепочки, система нелинейных разностных уравнений (3) сводится к дифференциальному уравнению

$$h^2 \cos(\Delta kh) \frac{\partial^2 \xi}{\partial z^2} = 2 \left( 1 - \cos(\Delta kh) - \frac{4\Delta\omega}{\omega_m} \right) \xi - 48\lambda \xi^3, \quad (4)$$

где  $k = \frac{\pi}{h} + \Delta k$ ,  $z = x - vt$ ,  $x$  – координата вдоль цепочки,  $v$  – скорость волны, определяющая

ся выражением

$$\frac{4\nu}{h\omega_m} \left(1 + \frac{\Delta\omega}{\omega_m}\right) + \sin(\Delta kh) = 0. \quad (5)$$

Уравнение (4) позволяет найти форму огибающей локализованных колебаний цепочки с параметром ангармонизма  $\lambda$ . Получающиеся решения имеют вид солитонов огибающей — рис. 1.

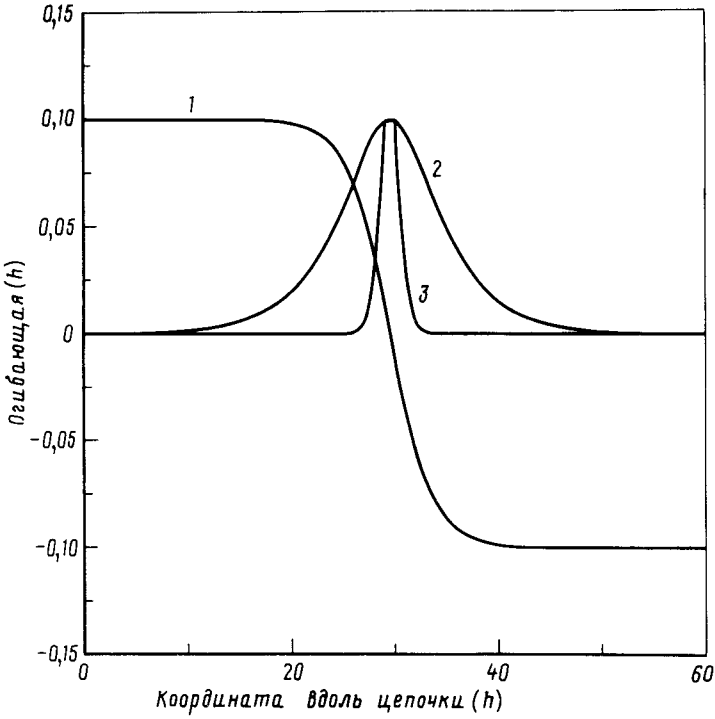


Рис. 1. Форма огибающей стационарных локализованных колебаний цепочки: 1) кинк  $u_n = A \cdot \text{th}(A(n - 29,5)\sqrt{-6\lambda})$ ,  $\lambda A^2 = -0,01$ ,  $A$  — амплитуда; 2) солитон огибающей  $u_n = A \text{sech}(A \cdot (n - 29,5)\sqrt{6\lambda})$ ,  $\lambda A^2 = 0,01$ ; 3) огибающая получена из решения уравнений (3),  $\lambda A^2 = 1,0$

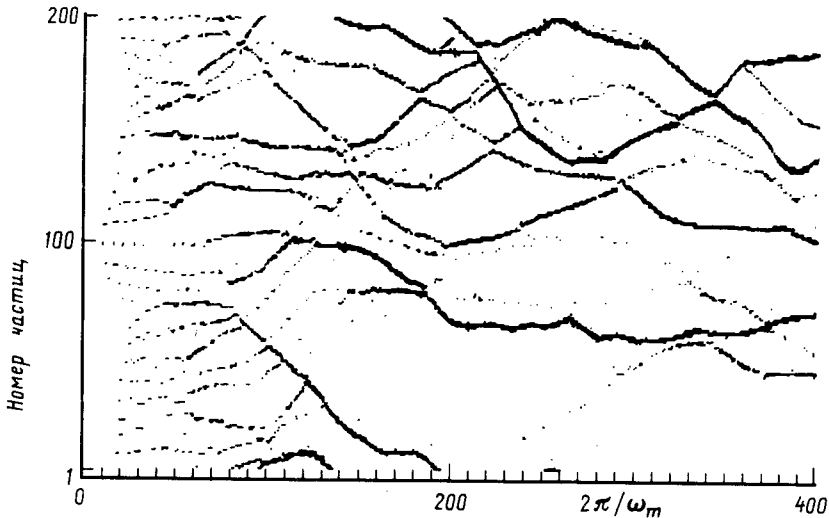


Рис. 2. Временной фурье-спектр движения частицы в центре стационарного локализованного колебания полученный методом молекулярной (МД) при возбуждении СЛК  $\lambda A^2 = 1,0$  в цепочке из 100 частиц массы  $m = 1$ . Наблюдение за движением частиц происходило в течение  $1024\pi/\omega_m$ . Пик расположен на частоте  $\omega_1 = 1,644\omega_m$ , численный расчет (3) дает  $\omega_1 = 1,656\omega_m$

В случае не малого ангармонизма (малый радиус локализации) приближение непрерывной среды неприменимо и необходимо численно решать уравнения (3). Полученные при численном решении значения смещений  $u_n$  частиц локализованного колебания (рис. 1в) использовались в качестве начальных для исследования движения цепочки методом молекулярной динамики (МД) <sup>6</sup>. Колебание сохраняло форму (с точностью лучше 1% по амплитуде) за время  $2048\pi/\omega_m$  фурье-спектр колебаний частиц показан на рис. 2. Полученные методом МД значения частот стационарных солитона огибающей и решения типа кинка огибающей практически совпадают с найденными из решения уравнений (3).

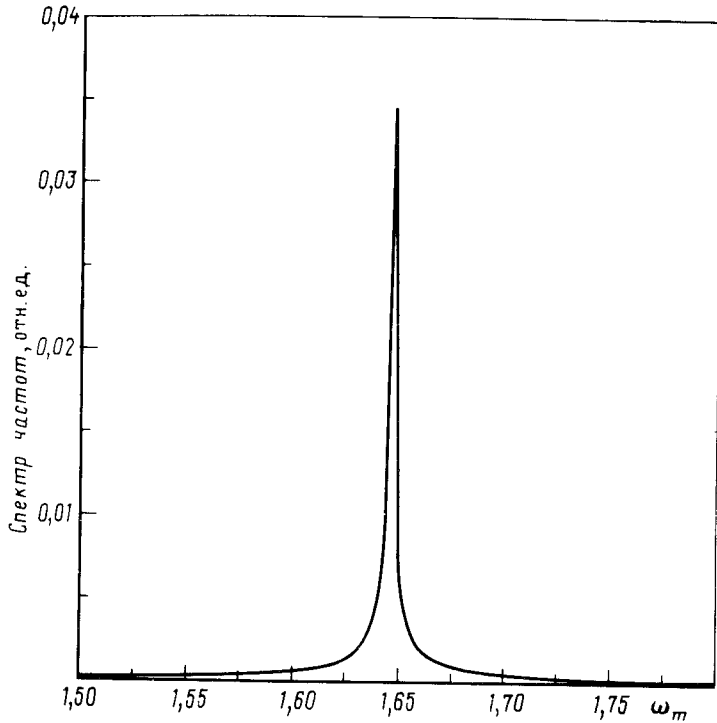


Рис. 3. Треки СЛК в цепочке из 200 частиц ( $m = 1, h = 1$ ), образующиеся при распаде моды с  $k = \pi/h$  ( $u^0 = 0,1h$ ). Точки соответствуют трехкратному превышению энергии частицы над средней на частицу. Параметры потенциала:  $K_2 = 9,87, K_4 = 98,7, (\lambda A^2 = 0.1)$ .

2. Как было обнаружено методом МД, возбуждение СЛК посредством задания одной-, двух- или трехчастичной конфигурации начальных смещений носит пороговый характер <sup>4</sup>. Настоящие исследования показали, что этот факт является следствием сильного несоответствия радиусов локализации начального и стабильного возбуждений, что может проявляться в пороговом характере потерь энергии быстрых частиц, локальным образом взаимодействующих с твердым телом.

3. Представляется интересным исследовать также устойчивость самой высокочастотной моды ангармонической цепочки в режиме слабо ангармонических колебаний. Оказалось, что введение слабого случайного возмущения (менее 1% по амплитуде) приводит к быстрому распаду моды с образованием нескольких СЛК, в которых энергия колебаний частиц на порядок превышает среднюю <sup>7</sup> — рис. 3. Последнее может отражать специфический механизм генерации дефектов (при превышении энергии СЛК порога дефектообразования) в однородной среде при интенсивном когерентном возбуждении. Следует отметить, что большое время жизни СЛК существенно повышает вероятность туннельной (допороговой) генерации дефектов.

## Литература

1. *Sievers A.J., Takeno S.* Phys. Rev. Lett., 1988, **61**, 970.
2. *Takeno S., Sievers A.J.* Sol. St. Commun., 1988, **67**, 1023.
3. *Takeno S. et al.* Prog. Theor. Phys., 1988, **94**, 242.
4. *Бурлаков В.М. и др.* Собственные локальные колебания в ангармонической цепочке, 1989, Препринт ИСАН № 12, г. Троицк, 18 с.
5. *Page J.B.* Принята к печати в Phys. Rev. B.
6. *Hockney R.W., Eastwood J.W.* Computer Simulation Using Particles, 1981, McGraw-Hill Inc.
7. Как известно, солитоны содержат большую часть энергии начального "квазиклассического" возбуждения системы. В.Е.Захаров, С.В.Манаков, С.П.Новиков, Л.П.Питаевский. Теория солитонов: метод обратной задачи, 1980, М.: Наука.

Институт спектроскопии  
Академии наук СССР

Поступила в редакцию  
4 апреля 1990 г.

---