

СОЛИТОННАЯ СТРУКТУРА РЕШЕТОЧНЫХ КОЛЕБАНИЙ В ОДНОМЕРНОЙ АНГАРМОНИЧЕСКОЙ ЦЕПОЧКЕ

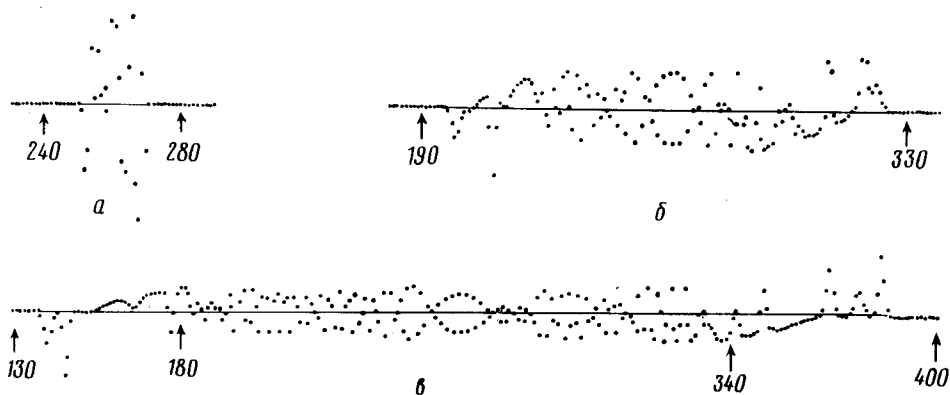
В. С. Жуков

С помощью предложенного метода проведено разделение солитонных и фоновых возбуждений в термализованной цепочке из 100 атомов, взаимодействующих по ангармоническому потенциалу Морзе, при двух значениях полной энергии. Определен вклад солитонов в энергию решеточных возбуждений.

Известно, что для решетки частиц, взаимодействующих по нелинейному закону, возможны возбужденные локализованные состояния в виде уединенных волн – солитонов. С другой стороны, в классическом подходе тепловое движение рассматривается как суперпозиция гармонических решеточных колебаний – фононов. Представляет интерес выяснить каким образом сосуществуют эти два типа решеточных возбуждений в твердых телах с взаимодействием близким к реальному. Чтобы решить этот вопрос предлагается проводить их разделение при помощи приема, который заключается в присоединении к термализованной цепочке атомов холодной цепочки¹. В процессе распространения теплового фронта солитонные возбуждения обгоняют его и становятся хорошо наблюдаемыми объектами.

Решеточные возбуждения исследовались методом молекулярной динамики в одномерной цепочке из 100 атомов, взаимодействующих друг с другом по ангармоническому потенциалу Морзе. Численное интегрирование классических уравнений движения частиц выполнялось по конечно-разностной схеме Бимона². Тепловое движение задавалось путем присвоения при помощи датчика случайных чисел первоначальных отклонений и скоростей каждому атому. Затем частицы совершали колебания при периодических граничных условиях в течение нескольких тысяч временных шагов для обеспечения теплового равновесия. Далее цепочка делилась на 5 фрагментов по 20 атомов и анализ солитонных возбуждений проводился для каждого участка в отдельности. Фрагмент термализованной цепочки включался в середину холодной цепочки из 500 неподвижных атомов. В дальнейшем рассматривалось методом молекулярной динамики распространение с течением времени тепловых колебаний

вправо и влево по образованной данным образом решетке из 520 частиц. Начальное и последующие состояния показаны на рисунке. В начальный момент времени колеблются атомы с номерами от 251 по 270. Через 2000 временных шагов тепловое движение охватывает участок атомов с 200 по 320. Так как полная энергия системы сохраняется, то при увеличении числа колеблющихся частиц средняя амплитуда движения уменьшается. Перед тепловым фронтом начинают появляться уединенные волны вследствие того, что их скорость выше скорости фронта. Через 4000 шагов солитонные возбуждения становятся отчетливо наблюдаемыми. Для случая, представленного на рисунке, солитоны движущиеся влево и имеющие отрицательные скорости находятся на участке цепочки с номерами атомов от 140 по 180, а распространяющиеся вправо с положительными скоростями на участке от 340 по 390. В тепловом движении атомов середины цепочки можно проследить элементы стоячих гармонических волн. Уединенные волны, движущиеся перед фронтом, обладают всеми свойствами солитонов. Их амплитуды и форма остаются неизменными при дальнейшем распространении. Скорость зависит от амплитуды. Уединенная волна с большей амплитудой обгоняет волну с меньшей не изменяя друг друга.



Мгновенные значения скоростей атомов в решетке: *а* – в начальный момент времени, *б* – через 2000 временных шагов, *в* – через 4000 шагов.

При достаточно большом числе временных шагов можно ожидать, что все солитоны существовавшие первоначально в термализованном фрагменте вышли вперед теплового фронта и произошло пространственное разделение солитонных и фоновых решеточных возбуждений. При этом становится возможным по отдельности вычислить их энергию, выяснить какой вклад дают солитонные возбуждения в общую тепловую энергию термализованной решетки. Такой анализ и вычисления были сделаны для двух значений полной энергии цепочки приходящейся на один атом и отнесенных к глубине потенциальной ямы межатомного взаимодействия. Энергия равной 0,044 соответствует вклад солитонов равный 0,26, энергии 0,254 отвечает доля солитонных возбуждений равная 0,39. Таким образом, возрастание энергии тепловых колебаний, их амплитуды, а следовательно, ангармонизма сопровождается ростом вклада солитонов в энергию возбуждения решетки.

Литература

1. Беттх Дж., Пауэлл Дж. Сб. Солитоны в действии. Под ред. Лонгрена К. и Скотта Э. М.: Мир, 1981, 269.
2. Veeman D. J. Comput. Phys., 1976, 20, 130.