

ТОЧНЫЕ СОЛИТОНОПОДОБНЫЕ РЕШЕНИЯ В ОБОБЩЕННЫХ ДИНАМИЧЕСКИХ МОДЕЛЯХ КВАЗИОДНОМЕРНОГО КРИСТАЛЛА

О. В. Гендельман, Л. И. Маневич

*Институт химической физики им. Н. Н. Семенова Российской академии наук
117977, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 18 февраля 1997 г.,
после переработки 13 мая 1997 г.

Рассматривается динамика одномерного кристалла на подложке с учетом как нелинейности взаимодействия с подложкой, так и внутримолекулярных дисперсии и нелинейности. Показано, что в таких моделях при специальном выборе вида потенциала подложки существуют солитоноподобные решения с выделенной скоростью. Этот потенциал позволяет независимо выбирать кривизну потенциальной ямы и высоту потенциального барьера и, следовательно, «глобально» моделирует реальный потенциал. Показано, что такое глобальное моделирование является корректным в первом приближении.

1. ВВЕДЕНИЕ

В ряде областей физики твердого тела при последовательном описании нелинейной динамики получаются уравнения, в которых, наряду с нелинейностью и дисперсией градиентного типа (т. е. членами, зависящими от производных искомого поля смещений), содержатся и члены, зависящие только от самого искомого поля. Такие уравнения могут содержать, например, комбинацию членов, характерных, с одной стороны, для моделей КдФ или МКдФ, а с другой — для моделей синус-Гордон, ϕ^4 и т. д.

Подобная структура уравнений выводит их из класса хорошо изученных, в том числе интегрируемых моделей. Более того, даже поиск решений солитонного типа приводит в этих случаях, вообще говоря, к неразрешимой аналитически проблеме для обыкновенного нелинейного уравнения четвертого порядка. Простейшим примером систем такого типа является одномерный кристалл на подложке.

Не удивительно поэтому, что в конкретных исследованиях обычно стараются обойти указанную принципиальную трудность, сохраняя либо нелинейность и дисперсию градиентного типа (и тогда в континуальном приближении получаются обычные модели типа КдФ или МКдФ), либо же только потенциал подложки с переходом к континуальным моделям типа синус-Гордон или ϕ^4 (во всех таких случаях задачи отыскания солитоноподобных решений сводятся к разрешимым нелинейным дифференциальным уравнениям второго порядка).

Между тем, можно указать случаи, когда подобное «усечение» оказывается неоправданным. В физике полимерных кристаллов, например, градиентные нелинейные и дисперсионные члены ответственны за внутримолекулярное, а неградиентные — за межмолекулярное взаимодействие. Хотя физическая природа этих взаимодействий различна, по порядку величины они могут совпадать. В дальнейшем будем называть обобщенными уравнения, содержащие нелинейность и дисперсию обоих типов.

Авторам известны только две работы, относящиеся к обобщенным моделям. В работе [1] приведены точные солитонные решения обобщенных уравнений

$$U_{tt} - c^2 U_{zz} - 6GU_z U_{zz} - FU_{zzzz} = -\frac{\partial \Psi}{\partial U} \quad (1)$$

и

$$U_{tt} - c^2 U_{zz} - HU_z^2 U_{zz} - PU_{zzzz} = -\frac{\partial \Phi}{\partial U} \quad (2)$$

при потенциалах подложки

$$\Psi = A(U^2 - 1)^2 \text{ (модель } \phi^4), \quad (3)$$

$$\Phi = B(1 + \cos \pi U) \text{ (модель синус-Гордон)}, \quad (4)$$

где U — скалярное поле смещений, G, F, H и P — коэффициенты при нелинейности и дисперсии, а c — скорость звука.

В случае уравнения (1) допускаются произвольные соотношения параметров, а скорость солитона при любом конкретном их выборе принимает лишь одно возможное значение. В случае уравнения (2) допускается лишь единственная комбинация параметров, но спектр скоростей солитона оказывается непрерывным. В работе [2] было доказано, что в последнем случае уравнение (2) точно интегрируемо методом обратной задачи рассеяния.

Градиентные члены уравнения (1) те же, что в известном уравнении Буссинеска, поэтому в дальнейшем называем его обобщенным уравнением Буссинеска. Уравнение (2) по аналогии естественно называть обобщенным модифицированным уравнением Буссинеска. Эти термины будут сохранены в дальнейшем и при более сложных потенциалах подложки.

С использованием компьютерной модели кристалла полиэтилена нами ранее было показано (методом молекулярной динамики) [3], что в полимерных кристаллах может наблюдаться преимущественная локализация крутильных и продольных нелинейных возбуждений на одной цепи, причем градиентные и неградиентные члены, как отмечалось в п. 1, должны играть сопоставимую роль. С учетом этого обстоятельства продольная и крутильная динамика полимерной цепи в кристалле описывается (в длинноволновом приближении) обобщенными и модифицированными уравнениями Буссинеска соответственно, но с более реалистичным потенциалом подложки. Потенциалы (3) и (4) недостаточны для такого описания. Причина состоит в том, что они представляют собой функции, в которых предопределена жесткая связь между кривизной потенциальной ямы и высотой потенциального барьера, который преодолевается при прохождении уединенной волны. Уравнение (2), кроме того, разрешимо лишь при строго определенном соотношении между дисперсией и нелинейностью. Эти ограничения неприемлемы для сколько-нибудь реалистичной модели полимерного кристалла.

В настоящей работе рассматриваются обобщенные модели, свободные от указанных выше ограничений и допускающие аналитические солитоноподобные решения.

2. ТОЧНЫЕ СОЛИТОНОПОДОБНЫЕ РЕШЕНИЯ В ОБОБЩЕННЫХ МОДЕЛЯХ

Рассмотрим простейшие возможные обобщения потенциалов подложки в уравнениях (1), (2), позволяющие снять первое из указанных выше ограничений. Для этого достаточно учесть следующие по порядку величины члены (для потенциала (3) — член шестой степени, а для потенциала (4) — косинус двойного угла). С учетом требования сохранения положений равновесия модифицированные потенциалы подложки записываются следующим образом:

$$\Psi^* = A_1(U^2 - 1)^2 + A_2(U^2 - 1)^3 \quad (\text{модель } \phi^4 - \phi^6), \quad (5)$$

$$\Phi^* = B_1 + B_2 + B_1 \cos \pi U + B_2 \cos 2\pi U \quad (\text{двойной синус-Гордон}). \quad (6)$$

Легко видеть, что такой выбор потенциалов позволяет независимо выбирать величины потенциального барьера и кривизны потенциальной ямы. По отношению к реальному потенциалу подложки эти приближения носят «глобальный» характер — они моделируют основные характеристики реального потенциала и не обязательно совпадают с первыми членами его разложений по соответствующим базисам — соответственно ряду Тейлора и ряду Фурье. Корректность такого подхода будет обоснована ниже (напомним, что в отличие от стандартных моделей $\phi^4 - \phi^6$ и двойного синус-Гордона в дальнейшем будут учитываться градиентные нелинейные члены).

Решение уравнения (1) с потенциалом (5) ищется в виде

$$U = \text{th } \kappa(z - Vt). \quad (7)$$

Подстановка этого соотношения в уравнение приводит к условиям, связывающим обратную полуширину солитона κ и его скорость V с параметрами задачи:

$$\kappa^2(c^2 - V^2) + 4F\kappa^4 = 2A_1, \quad -2G\kappa^3 + 4F\kappa^4 = A_2. \quad (8)$$

Решение уравнения (2) с потенциалом подложки (6) ищется в виде

$$U = -1 + \frac{4}{\pi} \arctg \left[\exp \left(\frac{\pi a}{2} (z - Vt) \right) \right]. \quad (9)$$

Соотношение (9) удовлетворяется при следующих условиях для параметров солитона:

$$a = 2 \left(\frac{4B_2}{2H - 3\pi^2 P} \right)^{1/4}, \quad c^2 - V^2 = \frac{4B_1}{a^2} + \frac{a^2(H - P\pi^2)}{2}. \quad (10)$$

Очевидно, что такое решение существует тогда и только тогда, когда выполняются следующие соотношения между параметрами модели:

$$2B_2H - 3\pi^2 P > 0, \\ c^2 - \frac{B_1}{\sqrt{4B_2/(2H - 3\pi^2 P)}} + 2\sqrt{\frac{4B_2}{2H - 3\pi^2 P}} (H - P\pi^2) > 0. \quad (11)$$

Оба решения соответствуют дискретному спектру скоростей: соотношения (8) могут давать два значения скорости, соотношения (10) — только одно. В зависимости от

параметров соответствующего обобщенного уравнения Буссинеска солитоны, задаваемые (7), (8), могут соответствовать как растяжению ($\kappa < 0$), так и сжатию ($\kappa > 0$) одномерного кристалла.

В системе обобщенных модифицированных уравнений Буссинеска (9), (10) солитоны растяжения и сжатия существуют при одних и тех же значениях параметров — если уравнения (10) имеют решение, то параметр a определяется с точностью до знака. Следует заметить также, что это решение существует в некотором непрерывном интервале соотношений между дисперсией и нелинейностью, а не при единственном их отношении. Таким образом, снимается и второе из упомянутых выше ограничений на применимость обобщенной модели Буссинеска. Разумеется, эта система уже неинтегрируема.

Решение (9), (10) для случая $B_2 = 0$ было получено ранее [4].

Полученные солитоноподобные решения (7), (9) отличаются от традиционных решений для систем с дискретно вырожденным потенциалом. Во-первых, эти решения могут иметь лишь одно или два фиксированных значения скорости солитона. Такое поведение решения для модели полимерного кристалла действительно было обнаружено в численном эксперименте [3] и не может быть объяснено в рамках традиционных моделей, дающих непрерывный спектр скоростей. Во-вторых, скорость длинноволнового звука не является для данного типа уравнений «критической», как в традиционных моделях. Другими словами, солитоны могут при определенных сочетаниях параметров двигаться со скоростью звука и иметь конечную энергию.

3. КОРРЕКТНОСТЬ «ГЛОБАЛЬНОЙ» АППРОКСИМАЦИИ ПОТЕНЦИАЛА ПОДЛОЖКИ

Рассмотрим вопрос о применимости «глобальной» аппроксимации реального потенциала подложки при помощи модельных потенциалов типа $\phi^4 - \phi^6$ или двойного синус-Гордона.

Рассмотрим обобщенную континуальную модель нелинейной цепочки на подложке. Она описывается уравнением

$$U_{tt} - c^2 U_{zz} - t_1 U_z^n U_{zz} - t_2 U_{zzzz} = -\frac{\partial \mathcal{V}}{\partial U}, \quad (12)$$

где n принимает значения 1 или 2, а потенциал \mathcal{V} удовлетворяет следующим условиям:

а) $\mathcal{V}(z) = \mathcal{V}(-z)$,

б) $z = 0$ — точка максимума, $z = \pm 1$ — точки минимума, другие экстремумы на интервале $(-1, 1)$ отсутствуют.

Топологический солитон уравнения (12) $u = u(z - Vt) = u(p)$ удовлетворяет следующим условиям:

$$\begin{aligned} u(p) &= -u(-p), \\ p \rightarrow \infty, \quad u &\rightarrow 1 - \text{dexp}(-\lambda p). \end{aligned} \quad (13)$$

Рассмотрим поведение солитоноподобного решения уравнения (12) при $p \rightarrow \infty$. Подстановка второго условия системы (13) в уравнение (12) с последующим пренебрежением кратными степенями экспоненты приводит к соотношению для показателя затухания топологического солитона на бесконечности:

$$\lambda^2(V^2 - c^2) - t_2\lambda^4 = -\omega, \tag{14}$$

где ω — кривизна потенциальной ямы вблизи точки $U = 1$. Уравнение (14) позволяет заключить, что порядок затухания решения на бесконечности определяется кривизной потенциальной ямы потенциала подложки.

Рассмотрим поведение того же решения вблизи $p = 0$. В силу антисимметрии (первое условие системы (13)) решение разлагается в ряд Тейлора по нечетным степеням p . Соотношение для вычисления коэффициентов этого ряда получается при умножении уравнения (12) на U_p и однократном интегрировании:

$$\frac{1}{2}(V^2 - c^2)U_p^2 - \frac{t_1}{n+2}U_p^{n+2} + \frac{1}{2}t_2(U_{pp}^2 - 2U_pU_{ppp}) = \mathcal{H} - \mathcal{V}. \tag{15}$$

Постоянная интегрирования $\mathcal{H} - \mathcal{V}(0)$ для искомого решения, «связывающего» положения равновесия, совпадает с высотой потенциального барьера подложки. Легко видеть, что при учете в уравнении (15) лишь членов наименьшего порядка малости в разложении решения вблизи нуля в правой части остается только эта величина.

Асимптотическая процедура нахождения решений уравнения (12) может состоять в вычислении разложения по экспонентам на бесконечности при помощи самого этого уравнения и разложения в ряд Тейлора вблизи нуля при помощи уравнения (15). Затем эти разложения могут быть сшиты при помощи аппроксимации Паде. Согласно общим теоремам теории Паде последовательные диагональные аппроксимации будут тогда сходиться к точному решению [5].

Продемонстрируем метод получения аппроксимации Паде солитоноподобного решения уравнения динамики обобщенной модели на примере уравнения (1) с потенциалом (5). Решение будем отыскивать в виде $U(x) = U(z - Vt)$. Для удобства проведем замену переменных $q(U) = U_x^2$.

При этом уравнение (1) с потенциалом (5) преобразуется к следующему виду:

$$\frac{1}{2}(V^2 - c^2)q' - 3Gp^{1/2}q' - \frac{F}{2} \left(q'''q + \frac{1}{2}q'q'' \right) = -4A_1U(U^2 - 1) - 6A_2U(U^2 - 1)^2. \tag{16}$$

После однократного интегрирования по U получаем

$$-(V^2 - c^2)q + 4Gq^{3/2} + F \left(q''q - \frac{1}{4}(q')^2 \right) = \mathcal{V}_1 + 2(A_1(U^2 - 1)^2 + A_2(U^2 - 1)^3). \tag{17}$$

Условиями того, что решение уравнения (17) будет солитоноподобным, является обращение функции q и ее первой производной в нуль в точках $U = \pm 1$. Легко видеть, что эти условия однозначно определяют выбор постоянной интегрирования: $\mathcal{V}_1 = 0$. Уравнение (17) «подсказывает» следующий вид разложения решения вблизи предельных точек:

$$\begin{aligned} U \rightarrow 1q &\sim A_0(1 - U)^2, \\ U \rightarrow -1q &\sim A_0(1 + U)^2. \end{aligned} \tag{18}$$

Сшивка двух этих разложений при помощи двухточечной аппроксимации Паде дает

$$q \sim \frac{1}{4}A_0(1 - U^2)^2. \tag{19}$$

Соотношения (17) и (19) содержат два неизвестных параметра — A_0 и V . Два уравнения для определения этих параметров получаются из (17) при подстановке в него соотношения (19) вблизи точек $U \rightarrow 1$ и $U \rightarrow 0$:

$$(c^2 - V^2)A_0 + FA_0^2 = 8A_1, \quad (20)$$

$$(c^2 - V^2)\frac{1}{4}A_0 + \frac{1}{2}GF_0^{3/2} - \frac{1}{4}A_0^2F = 2(A_1 - A_2). \quad (21)$$

Правая часть первого уравнения представляет собой кривизну потенциальной ямы. В последнем уравнении в правой части от потенциала остается лишь общая высота барьера. Полагая $A_0 = 4\kappa^2$, легко видеть, что два этих уравнения совпадают с соотношениями (8) для параметров точного солитоноподобного решения уравнения (1) с потенциалом (5).

Расчет следующих членов разложения требует, разумеется, более детальной информации о потенциале подложки. Тем не менее, как было показано выше, вычисление первых членов разложений вблизи нуля и на бесконечности требует знания лишь высоты потенциального барьера и кривизны потенциальной ямы. В этом смысле удовлетворительным приближением является любой потенциал подложки, в котором эти параметры правильно «подогнаны». Обобщенные модели, введенные в предыдущем разделе, позволяют, таким образом, найти в первом приближении солитоноподобные решения для любых реальных потенциалов подложки, обладающих нужной симметрией, в тех случаях, когда дисперсия и нелинейность учитываются в главных порядках.

Авторы выражают благодарность Российскому фонду фундаментальных исследований (проект 95-03-09026) за финансовую поддержку этой работы.

Литература

1. A. S. Kovalev, A. M. Kosevitch, *Solid State Commun.* **12**, 763 (1973).
2. K. Konno, W. Kameyama, and H. Sanuki, *J. Phys. Soc. Jap.* **37**, 171 (1974).
3. N. K. Balabaev, O. V. Gendelman, and L. I. Manevitch, submitted to *Phys. Rev. Lett.*
4. С. А. Беклемишев, В. Л. Клочихин, частное сообщение.
5. Г. Бейкер, П. Грейвс-Моррис, *Аппроксимации Паде*, Мир, Москва (1986).