

На правах рукописи

БЕБИХОВ ЮРИЙ ВЛАДИМИРОВИЧ

ВОЛНЫ СОЛИТОННОГО ТИПА В ОДНОМЕРНЫХ ДИСКРЕТНЫХ
СИСТЕМАХ СВОБОДНЫХ ОТ ПОТЕНЦИАЛА ПАЙЕРЛСА-НАБАРРО

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Специальность 01.04.07 - физика конденсированного состояния

Барнаул – 2010

Работа выполнена в Алтайском государственном техническом университете и в Институте проблем сверхпластичности металлов РАН.

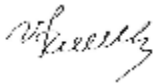
Научные руководители	<p>доктор физико-математических наук, профессор, Старостенков Михаил Дмитриевич, Алтайский государственный технический университет</p> <p>доктор физико-математических наук, Дмитриев Сергей Владимирович, Институт проблем сверхпластичности металлов РАН</p>
Официальные оппоненты:	<p>доктор физико-математических наук, профессор, Колупаева Светлана Николаевна</p> <p>доктор физико-математических наук, профессор, Попов Валерий Андреевич,</p>
Ведущая организация:	Институт механики сплошных сред УрО РАН, г. Пермь

Защита состоится 27 апреля 2010 г. в 12 час. на заседании диссертационного совета Д212.004.04 при Алтайском государственном техническом университете по адресу: 656038, г. Барнаул, пр. Ленина, 46.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке Алтайского государственного технического университета.

Автореферат разослан марта 2010 г.

Ученый секретарь диссертационного
совета,
кандидат физико-математических наук



Романенко В.В.

Примечание: отзывы на автореферат, заверенные гербовой печатью организаций, просим присылать в 2-х экз. на адрес университета.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность проблемы. Теоретическое изучение дискретных систем является традиционным в физике конденсированного состояния, например, при изучении колебательных спектров идеальных кристаллов, а также колебательных мод, локализованных вблизи дефектов кристаллической структуры. В последние несколько десятилетий необычайно вырос интерес к задачам, где смещения атомов от решеточных положений значительны и требуется учет нелинейных слагаемых в разложении сил межатомных взаимодействий. Нелинейные дискретные системы, по сравнению с линейными, проявляют целый ряд качественно новых физических свойств, среди которых одним из важнейших является возможность существования в них волн солитонного типа (ВСТ). ВСТ необычайно устойчивы по отношению к возмущениям и, в случаях близких к интегрируемым, взаимодействуют друг с другом почти упруго, то есть восстанавливают свои свойства после столкновения. Таким образом, ВСТ способны эффективно осуществлять перенос энергии, импульса, вещества, электрического заряда и др., что и делает их исключительно важными для физики конденсированного состояния. Такого рода волны возможны и в континуальных нелинейных системах, но дискретность среды вносит заметные коррективы в их свойства и даже может приводить к появлению качественно новых свойств. С математической точки зрения, дискретизация приводит к потере трансляционной симметрии системы, а в физическом плане это проявляется в появлении периодического потенциала, который ВСТ вынуждена преодолевать при движении вдоль кристалла от одной ячейки периодичности к другой. В теории дислокаций этот потенциал получил название потенциала Пайерлса-Набарро (пПН), и позже этот термин стал использоваться и в других приложениях. Революцией в теории нелинейных дискретных систем стало открытие Тодой полностью интегрируемой цепочки [1], где кинковые решения не испытывают действия пПН. Впоследствии были открыты и другие интегрируемые дискретные нелинейные цепочки, например, цепочка Абловица-Ладики [2], но всё же число таких систем остается весьма ограниченным. С другой стороны, известен ряд неинтегрируемых нелинейных дискретных уравнений, допускающих точные решения, например, уравнения, сводящиеся к нелинейному отображению Квипела-Робертса-Томпсона [3]. Роль таких решений, как в теории нелинейных дискретных систем, так и в их физических приложениях весьма значительна.

В последние десятилетия дискретные нелинейные системы привлекают всё большее внимание в различных разделах физики, например, в физике фазовых превращений, физике пластической деформации, в нелинейной оптике, в физике Бозе-Эйнштейновского конденсата, при исследовании волн кальция в живых клетках, сверхпроводящих Джозефсоновских кон-

тактов, и в целом ряде других областей [4-6]. Дискретность материи на молекулярном и атомарном уровне становится заметной при работе с наноразмерными системами.

Таким образом, весьма актуальными являются следующие задачи, рассматриваемые в настоящей работе:

- построение дискретных аналогов для уравнения Клейн-Гордона и нелинейного уравнения Шредингера, для которых статические (стационарные) задачи сводятся к интегрируемым отображениям, используя методологию, предложенную в работе [7];
- изучение законов сохранения полученных дискретизаций;
- полуаналитическое и численное исследование свойств ВСТ для таких дискретных моделей;
- физическая интерпретация полученных результатов.

Цель и задачи исследования:

Целью диссертационной работы является исследование волн солитонного типа в нелинейных дискретных уравнениях Клейн-Гордона и Шредингера без потенциала Пайерлса-Набарро.

Для достижения данной цели возникает необходимость решения следующих задач:

1. Построение дискретных аналогов уравнения Клейн-Гордона и нелинейного уравнения Шредингера, для которых статические решения свободны от потенциала Пайерлса-Набарро.
2. Получение и всесторонний анализ некоторых решений этих уравнений.
3. Физическая интерпретация полученных уравнений и их решений в контексте физики конденсированных сред.

Научная новизна:

1. Впервые построена дискретная модель Клейн-Гордона без потенциала Пайерлса-Набарро с асимметричным локальным потенциалом.
2. Исследован ратчет кинка в этой дискретной модели при отсутствии и при наличии вязкости и показано, что скорость дрейфа кинка очень слабо зависит от параметра дискретности, и что при достаточно большом значении коэффициента вязкости происходит смена направления движения кинка.
3. Для обобщенного дискретного нелинейного уравнения Шредингера исследованы законы сохранения энергии, нормы и импульса, и получен ряд новых точных решений, как в замкнутой форме, так и в виде двухточечных нелинейных отображений.

Научная и практическая ценность работы:

1. Результаты исследования свойств кинковых решений свободных от потенциала Пайерлса-Набарро в дискретной модели Клейн-Гордона с асимметричным потенциалом, а также получение целого ряда точных решений

обобщенного дискретного нелинейного уравнения Шредингера представляют несомненную научную ценность работы.

2. С практической точки зрения, отсутствие потенциала Пайерлса-Набарро в исследованных дискретных моделях приводит к высокой подвижности топологических солитонов, что означает повышенные транспортные свойства таких моделей. Исследованные уравнения находят широкое применение в физике конденсированного состояния при описании свойств топологических дефектов кристаллов (доменные стенки, дислокации), а также в других разделах физики.

На защиту выносятся следующие положения:

1. Ратчет кинковых решений свободных от пПН в дискретной модели Клейн-Гордона существенно отличается от такового в дискретной модели с пПН. В частности, было показано, что в модели без пПН скорость дрейфа кинка очень слабо зависит от параметра дискретности и дрейф кинка наблюдается при сколь угодно малом значении амплитуды внешней периодической силы. Дрейфовая скорость кинка меняет знак при достаточно большом значении коэффициента вязкости.

2. Получен ряд новых точных решений обобщенного дискретного нелинейного уравнения Шредингера в явной форме и в форме двухточечных нелинейных отображений, а также перечень некоторых законов сохранения этого уравнения.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались на следующих научных форумах: X Международная школа-семинар "Эволюция дефектных структур в конденсированных средах" (ЭДС – 2008), 8-12 сентября 2008, г. Барнаул, г. Бийск; Всероссийская молодежная научная конференция «Мавлютовские чтения», 28-29 октября 2008, г. Уфа; Международная научно-практическая конференция "Проблемы и перспективы развития литейного, сварочного и кузнечно-штамповочного производства", ноябрь 2008, г. Барнаул; Всероссийская научная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых "Наука. Технологии. Инновации" (НТИ-2008), 4-7 декабря 2008, г. Новосибирск; Международный симпозиум «Перспективные материалы и технологии» 25-29 мая 2009, г. Витебск, Беларусь; X Международная научно-техническая уральская школа-семинар металловедов – молодых ученых, 7-11 декабря 2009, г. Екатеринбург.

Публикации. Результаты исследований опубликованы в 14 печатных работах.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, двух приложений и списка литературы из 126 наименований. Работа изложена на 123 страницах машинописного текста, содержит 15 рисунков.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность исследуемой проблемы, сформулирована цель диссертационной работы, описаны научная новизна, практическая ценность и основные защищаемые положения. Дается краткое содержание работы по главам.

В первой главе дан обзор работ, где рассматриваются нелинейные дискретные уравнения, их физические приложения, методы построения и анализа точных решений таких уравнений, а также формулируются открытые проблемы, на частичное решение которых направлено данное диссертационное исследование.

Вторая глава диссертации посвящена построению дискретного аналога уравнения Клейн-Гордона с асимметричным потенциалом по методике [7], описанной в разделе 2.1. В разделе 2.2 данная методика впервые применена к построению модели с несимметричным локальным потенциалом.

Континуальная модель Клейн-Гордона имеет гамильтониан

$$H = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} [f_t^2 + f_x^2 + 2V(f)] dx, \quad (1)$$

где $f(x,t)$ неизвестное поле, а $V(f)$ заданный потенциал. Соответствующее уравнение движения имеет вид

$$f_{tt} = f_{xx} - V'(f). \quad (2)$$

Дискретизируем уравнения (1) и (2) по переменной $x_n = hn$, где $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, а $h > 0$ - шаг решетки. Выпишем традиционную дискретизацию уравнения (2)

$$f_n^{\ddot{}} = \frac{1}{h^2} (f_{n-1} - 2f_n + f_{n+1}) - V'(f_n), \quad (3)$$

где кинковые решения испытывают ппн.

Дискретизация, допускающая кинковые решения свободные от ппн, имеет вид [7]:

$$f_n^{\ddot{}} = -v(h, f_{n-1}, f_n) \frac{\partial}{\partial f_n} v(h, f_{n-1}, f_n) - v(h, f_n, f_{n+1}) \frac{\partial}{\partial f_n} v(h, f_n, f_{n+1}), \quad (4)$$

где

$$v(h, f_{n-1}, f_n) \equiv \pm \frac{1}{h} (f_n - f_{n-1}) - \frac{G(f_n) - G(f_{n-1})}{f_n - f_{n-1}} = 0, \quad (5)$$

$$G'(f) = \sqrt{2V(f)}. \quad (6)$$

Выбрав локальный потенциал в виде

$$V(f) = \frac{1}{2} (af^4 + bf^2 + cf + d)^2, \quad (7)$$

где a, b, c, d - константы, конкретизируем представленные выше дискретизации.

Простая дискретная модель Клейн-Гордона (3) с потенциалом (7) (обозначим ее как ДМКГ1) имеет вид

$$f_n^{\&} = \frac{1}{h^2} (f_{n-1} - 2f_n + f_{n+1}) - (af_n^4 + bf_n^2 + cf_n + d)(4af_n^3 + 2bf_n + c). \quad (8)$$

Гамильтониан ДМКГ1 имеет вид

$$H_1 = \frac{1}{2} \sum_n \left\{ f_n^{\&} + \frac{1}{h^2} (f_n - f_{n-1})^2 + (af_n^4 + bf_n^2 + cf_n + d)^2 \right\}. \quad (9)$$

Более сложная дискретная модель Клейн-Гордона (ее обозначим ДМКГ2) определяется формулой (4), где для потенциала (7) имеем

$$v(f_{n-1}, f_n) = \frac{f_n - f_{n-1}}{h} - \frac{a}{5} (f_n^4 + f_n^3 f_{n-1} + f_n^2 f_{n-1}^2 + f_n f_{n-1}^3 + f_{n-1}^4) - \frac{b}{3} (f_n^2 + f_n f_{n-1} + f_{n-1}^2) - \frac{c}{2} (f_n + f_{n-1}) - d. \quad (10)$$

Гамильтониан ДМКГ2 имеет вид

$$H_2 = \frac{1}{2} \sum_n \left\{ f_n^{\&} + [u(f_{n-1}, f_n)]^2 \right\}. \quad (11)$$

За асимметрию потенциала отвечает параметр c . При $c = 0$ потенциал является симметричным. Потенциал (7) зависит от четырех параметров. Зафиксируем высоту потенциального барьера на уровне 0.5, а расстояние между минимумами выберем равным 2. Степень асимметрии будем варьировать параметром c . Остается еще один свободный параметр b , который положим равным нулю. На рис. 1 изображен потенциал (7) для различных значений параметров.

Численные расчеты в данной работе будут проводиться при следующих значениях параметров потенциала (7): $a = -0.643049$, $b = 0$, $c = 0.626843$, $d = 0.706344$. В этом случае координаты минимумов потенциала будут $f_1 = -0.768678$ и $f_2 = 1.231321$, а координата максимума $f_{\max} = 0.62462$.

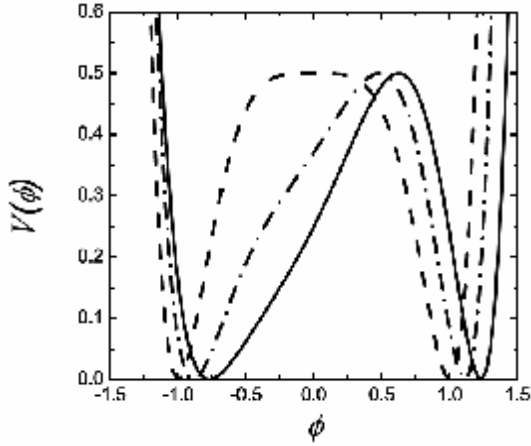


Рис. 1. Потенциал (7) для $b=0$ при $a=-1$, $c=0$, $d=1$ (пунктирная линия); $a=-0.83988$, $c=0.382925$, $d=0.860756$ (штрих пунктирная линия); $a=-0.643049$, $c=0.626843$, $d=0.706344$ (сплошная линия)

Асимметрия потенциала предполагает наличие двух различных вакуумных решений $f_n = f_1$ и $f_n = f_2$, где f_1 и f_2 координаты двух минимумов потенциала. Мало-амплитудные фоновые колебания вида $f_n \approx \exp[i(qn - wt)]$, где q – волновое число и w – частота, имеют различный спектр для различных вакуумов.

Границы фонового спектра для каждого вакуума ДМКГ2 могут быть найдены по формулам

$$w_{1,i}^2 = 28a^2 f_i^6 + 30abf_i^4 + 20acf_i^3 + 3(2b^2 + 4ad)f_i^2 + 6bcf_i + c^2 + 2bd, \quad (12)$$

$$w_{2,i}^2 = \frac{28a^2 f_i^6}{25} + 2abf_i^4 + \frac{4acf_i^3}{5} + 6\left(\frac{b^2}{9} + \frac{2ad}{5}\right)f_i^2 + \frac{2bcf_i}{3} + \frac{2bd}{3} + \frac{4}{h^2}, \quad (13)$$

где $i=1,2$, а $w_{1,i}$ ($w_{2,i}$) соответствует $q=0$ ($q=p$).

Для ДМКГ1 граница спектра, соответствующая $q=0$, совпадает с $w_{1,i}$ в ДМКГ2, тогда как $w_{2,i}$, соответствующая $q=p$, может быть найдена по формуле:

$$w_{2,i}^2 = 28a^2 f_i^6 + 30abf_i^4 + 20acf_i^3 + 3(2b^2 + 4ad)f_i^2 + 6bcf_i + c^2 + 2bd + \frac{4}{h^2}. \quad (14)$$

В разделе 2.3. описаны численные и полуаналитические процедуры, используемые при построении равновесных кинковых решений для ДМКГ1 и ДМКГ2. Для модели ДМКГ1, заданной уравнением движения (8), метод нахождения точных статических кинковых решений не известен, и приходится прибегать к численным методам. Среди таких методов наиболее популярными являются метод стрельбы и градиентный метод. Для ДМКГ2 статические кинковые решения могут быть найдены итерационно из двухточечного отображения $v(\mathbf{f}_{n-1}, \mathbf{f}_n) = 0$, левая часть которого задана выражением (10). В качестве начального значения можно выбрать любое \mathbf{j}_n (или \mathbf{j}_{n-1}), лежащее между двумя минимумами потенциала. Таким образом, статическая задача для ДМКГ2 имеет континуум решений, параметризованных выбором начального значения отображения. Этот факт говорит об отсутствии ппн в такой модели, поскольку равновесный кинк может быть размещен произвольно относительно решетки. Хорошо известно, что классическая дискретизация приводит к появлению ппн и поэтому статическая задача для уравнения ДМКГ1 имеет лишь несколько решений, соответствующих экстремумам ппн, причем, минимумам отвечают устойчивые, а максимумам – неустойчивые равновесные решения.

В третьей главе, в разделах 3.1 и 3.2, исследуются свойства кинковых решений дискретной модели Клейн-Гордона, построенной во второй главе, а в разделах 3.3 и 3.4 изучается ратчет (ratchet) кинка при действии внешней силы, изменяющейся во времени по гармоническому закону.

Ратчетом называется движение частицы в определенном направлении под действием силы, изменяющейся во времени и имеющей среднее нулевое значение. Ратчет возможен при выполнении следующих двух условий: система должна находиться в термодинамически неравновесном состоянии и пространственно-временная симметрия системы должна быть понижена [6]. Ратчет представляет собой один из механизмов переноса вещества и активно изучается в приложении к самым разнообразным системам, например, в биологии, молекулярных двигателях, джозефсоновских сверхпроводящих контактах, нелинейной оптике, бозе-эйнштейновском конденсате и физике твердого тела. Ратчет солитонов впервые изучался Марчесони [8] для задемпфированного уравнения Клейн-Гордона. В отличие от точечных частиц, солитоны могут иметь внутренние колебательные моды [9], которые могут оказывать существенное влияние на ратчет, особенно в случае малой вязкости. До настоящего времени ратчет изучался в основном для солитонов в континуальных уравнениях, в то время как эксперимен-

тально наблюдаемый ратчет солитонов чаще всего относится к дискретным системам. Влияние дискретности на ратчет кинков изучалось в работе Золотарюка и Салерно [10]. Они показали, что учет дискретности приводит к появлению новых эффектов, например, к необходимости приложения внешней силы с амплитудой достаточной для преодоления пПН.

Спектр малоамплитудных колебаний цепочки, содержащей кинк, для различных значений параметра дискретизации решетки h , изображен на рис. 2, где (а) соответствует результату для модели с пПН, а (б) без пПН.

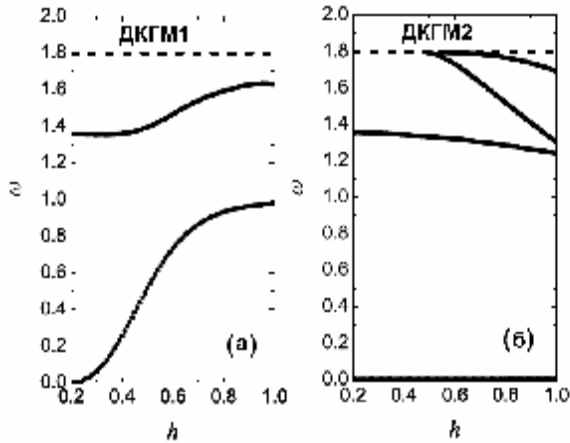


Рис. 2. Спектр малоамплитудных колебаний цепочки, содержащей кинк, для различных значений параметра дискретизации решетки h : (а) модель с пПН, (б) модель без пПН. Здесь и далее параметры локального потенциала $a = -0.643049$, $b = 0$, $c = 0.626843$, $d = 0.706344$.

Пунктирная горизонтальная линия указывает нижнюю границу фонованного спектра, которая совпадает для обеих моделей и может быть найдена из (12) при $i = 1$. На этих спектрах видны частоты колебательных мод, локализованных на кинках. Обе модели имеют один и тот же непрерывный предел и при малых значениях параметра дискретности ($h < 0.25$) их спектры близки. Кинк в модели с пПН при малых h имеет трансляционную моду с частотой близкой к нулю. С ростом h частота этой моды растет и кинк теряет подвижность. Модель без пПН имеет трансляционную моду с нулевой частотой для любого значения h . Кроме того, кинки в обеих моделях имеют внутреннюю колебательную моду, частота которой зависит от h , и при малых h равна примерно 1.35.

Для изучения ратчета кинка добавим в правые части уравнений движения (4) и (8) гармоническую силу

$$F = A \cos(\Omega t + j), \quad (15)$$

с амплитудой A , частотой Ω и начальной фазой j .

Начальные условия следующие: имеется статический равновесный кинк и при $t = 0$ начинает действовать периодическая сила (15).

Сначала обсудим ратчет без учета вязкости, где мы вынуждены ограничиться случаем когда движущая сила имеет малую амплитуду ($A \leq 0.04$) и частоту, лежащую вне фонованого спектра (точнее ниже фонованого спектра). При несоблюдении этих условий будут активно возбуждаться фонованые моды и изучение ратчета кинка станет невозможным. Изучение ратчета в отсутствии вязкости позволяет непосредственно находить силу, действующую на кинк со стороны внешнего поля. Эта сила пропорциональна ускорению кинка, которое и измерялось в наших вычислениях.

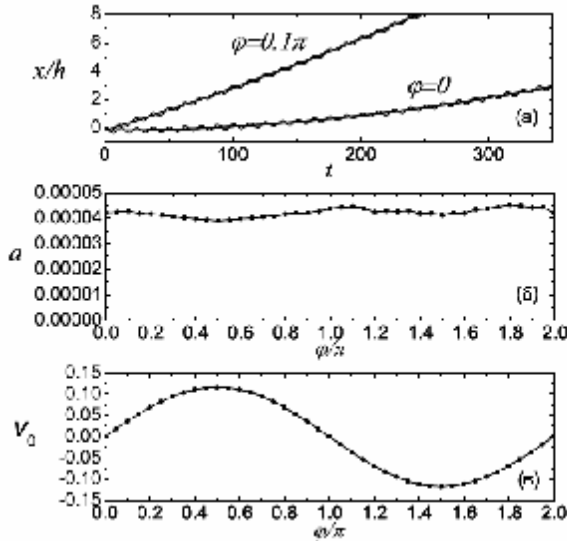


Рис.3. Движение кинка для различных значений начальной фазы j внешней силы (15). Параметры $h = 0.6$, $A = 0.4$, $\Omega = 0.5$.

На рис. 3 представлено влияние начальной фазы j внешней силы (15) на динамику кинка для случая $h = 0.6$, $A = 0.4$, $\Omega = 0.5$. На панели (а) по-

казаны примеры изменения во времени координаты кинка для $j = 0$ и $j = p/10$ (осциллирующие линии) а также квадратичные параболы

$$x(t) = at^2 + u_0t + x_0, \quad (16)$$

построенные методом наименьших квадратов для этих траекторий. Смысл коэффициентов параболы известен: здесь a – ускорение, u_0 и x_0 – начальные скорость и положение частицы. На панелях (б) и (в) даны a и u_0 как функции j . Видно, что если усреднить u_0 по фазе, получится ноль, в то время как ускорение практически не зависит от j и отлично от нуля. В дальнейшем всегда будем полагать $j = 0$.

Изучим влияние параметров A , Ω и h на динамику кинка в ДМКГ2.

На рис.4 представлено ускорение кинка как функция частоты движущей силы при различных значениях параметра A для $h = 0.6$. Вертикальная сплошная линия показывает частоту колебательной моды локализованной на кинке, а пунктирная показывает нижний уровень фонного спектра.

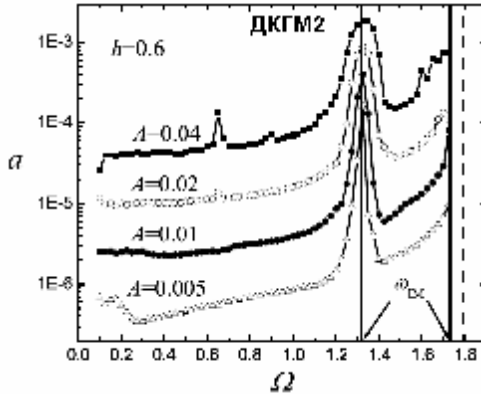


Рис.4. Влияние частоты движущей силы Ω на ускорение кинка при различных значениях амплитуды A . Начальная фаза $j = 0$, параметр дискретности $h = 0.6$.

Из рис.4 видно, что ускорение возрастает на два порядка, когда частота вынуждающей силы Ω приближается к значению частоты колебательной моды кинка $\omega_{IM} = 1.32$. Также видно, что ускорение увеличивается при приближении частоты движущей силы к другой частоте колебательной

моды кинка $w_{IM} = 1.73$. Однако это увеличение может быть объяснено приближением частоты Ω к границе фононного спектра $w_1 = 1.795$. Также результаты, показанные на рис. 4, свидетельствуют о том, что ускорение a пропорционально квадрату амплитуды A .

Рассмотрим влияние параметра дискретности h на зависимость ускорения кинка от частоты. Результаты представлены на рис.5. Для $\Omega < 1.2$, то есть в нерезонансной области частот, результаты для разных h близки друг к другу. Различия наблюдаются в области частот вынуждающей силы, близких к частотам колебательных мод, локализованных на кинке, т.е. для $\Omega > 1.2$ (см. рис.2б).

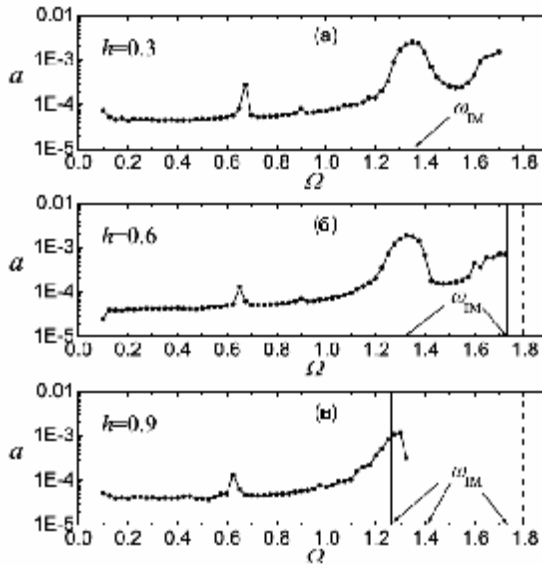


Рис.5. Зависимость ускорения кинка a от частоты движущей силы Ω при различных значениях параметра дискретности h для амплитуды $A = 0.4$ и начальной фазы $j = 0$. Вертикальные сплошные линии – частоты колебательных мод кинка, пунктирная – граница фононного спектра

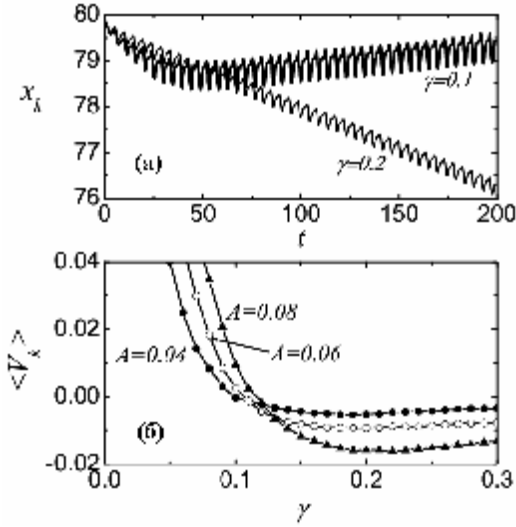


Рис. 6. (а) Траектории кинка $x(t)$ для двух значений коэффициента вязкости, $g = 0.1$ (жирная линия) и $g = 0.2$ (тонкая линия) для частоты вынуждающей силы равной $\Omega = 1.35$ и $A = 0.08$, $h = 0.4$. (б) Влияние коэффициента вязкости g на скорость дрейфа кинка $\langle V_k \rangle$ для трех различных значений амплитуд вынуждающей силы A . Здесь использовалось $\Omega = 1.35$ и $h = 0.4$.

Наконец, исследуем влияние вязкости на ратчет кинка в ДМКГ2, для чего в левую часть уравнения движения (4) добавим член $gf_n^{\&}$, где g - коэффициент вязкости. На рис. 6 (а) показаны две траектории кинка $x(t)$ для двух значений коэффициента вязкости, $g = 0.1$ (жирная линия) и $g = 0.2$ (тонкая линия). Видно, что кривые $x(t)$ осциллируют с частотой вынуждающей силы, которая была выбрана равной $\Omega = 1.35$, и в установившемся режиме движения устанавливаются постоянные дрейфовые скорости кинка. В данных расчетах мы полагали $A = 0.08$ и $h = 0.4$. Скорость дрейфа кинка, которую обозначим через $\langle V_k \rangle$, измерялась на отрезке времени $300 \leq t \leq 1000$ в режиме установившегося движения. Заметим, что для двух примеров, показанных на рис. 6 (а), дрейфовые скорости кинков оказываются разного знака. Ратчет без учета вязкости всегда приводил к

положительному ускорению кинка, так что изменение направления эффективной движущей силы, действующей на кинк, связано именно с наличием в системе вязкости.

Влияние коэффициента вязкости g на скорость дрейфа кинка $\langle V_k \rangle$ показано на рис. 6 (б) для трех различных значений амплитуд вынуждающей силы A . Здесь использовалось $\Omega = 1.35$ и $h = 0.4$. Можно видеть, что для всех трех значений амплитуд, $\langle V_k \rangle$ положительно для малых g и становится отрицательным при достаточно больших значениях g . При этом, с ростом g , отрицательное значение дрейфовой скорости сначала растет по абсолютной величине, а затем начинает уменьшаться, приближаясь к нулю. Смена знака дрейфовой скорости происходит при значении g^* , которое растет с ростом амплитуды вынуждающей силы A . Значение g^* , при котором наблюдается максимальная отрицательная скорость, также растет с ростом A .

Таким образом, показано, что для кинка не испытывающегося пПН в модели с нелинейным локальным потенциалом под действием гармонической внешней силы, кинк движется равноускоренно до тех пор, пока его скорость не становится слишком большой и становятся заметными потери на излучение. К нашему удивлению, ускорение кинка слабо зависит от параметра дискретности h , что может быть объяснено только отсутствием пПН в данной модели. При приближении частоты внешней силы к частоте собственной колебательной моды, локализованной на кинке, происходит рост ускорения кинка на два порядка. При учете вязкости при изучении ратчета кинка в ДМКГ2 было установлено, что дрейфовая скорость кинка меняется с положительной на отрицательную если значение коэффициента вязкости g оказывается больше некоторого значения.

В четвертой главе рассматривается обобщенное дискретное нелинейное уравнение Шредингера с кубической нелинейностью

$$iy_n'' = -e(y_- - 2y_n + y_+) - f(y_-, y_n, y_+), \quad (17)$$

где использована сокращенная форма записи $y_- = y_{n-1}$, $y_+ = y_{n+1}$, и

$$\begin{aligned}
f(y_-, y_n, y_+) &= a_1 |y_n|^2 y_n + a_2 |y_n|^2 (y_- + y_+) + a_3 y_n^2 (y_-^* + y_+^*) \\
&+ a_4 y_n (|y_-|^2 + |y_+|^2) + a_5 y_n (y_- y_+^* + y_+ y_-^*) + a_6 y_n^* (y_-^2 + y_+^2) \\
&+ a_7 y_- y_n^* y_+ + a_8 (|y_+|^2 y_+ + |y_-|^2 y_-) + a_9 (y_-^* y_+^2 + y_+^* y_-^2) \\
&+ a_{10} (|y_+|^2 y_- + |y_-|^2 y_+) + a_{11} y_n (|y_- y_n| + |y_n y_+|) \\
&+ a_{12} (y_+ |y_n y_+| + y_- |y_- y_n|) + a_{13} (y_+ |y_- y_n| + y_- |y_n y_+|) \\
&+ a_{14} (y_+ |y_- y_+| + y_- |y_n y_+|),
\end{aligned} \tag{18}$$

с вещественными коэффициентами a_i , удовлетворяющими условию континуального перехода

$$\begin{aligned}
&a_1 + a_7 + 2(a_2 + a_3 + a_4 + a_5 + a_6) + \\
&+ 2(a_8 + a_9 + a_{10} + a_{11} + a_{12} + a_{13} + a_{14}) = \pm 2.
\end{aligned} \tag{19}$$

Верхний (нижний) знак в (19) соответствует фокусирующей (дефокусирующей) нелинейности. Отметим, что функция f , заданная выражением (18), была выбрана симметричной по отношению к перестановке $y_- \leftrightarrow y_+$. Как уже отмечалось, представленная выше модель обобщает многие из вариантов ДНУШ, рассматривавшихся ранее в литературе.

В разделе 4.3.1. описаны некоторые законы сохранения, выполняющиеся для рассматриваемого ДНУШ при определенных условиях, накладываемых на коэффициенты a_i .

Например, прямой подстановкой в выражение $dN/dt = 0$ несложно показать, что ДНУШ (17), (18) с произвольными $a_1, a_2, a_5, a_6, a_{11}, a_{12}$, при выполнении условий $a_2 = a_3 + a_8$ и $a_7 = a_9 = a_{10} = a_{13} = a_{14} = 0$, сохраняет норму

$$N = \sum_n y_n y_n^*. \tag{20}$$

С другой стороны, если a_2, a_{14} произвольны, при $a_4 = a_1 + a_6$, $a_5 = a_6$, $a_7 = a_4 + a_5$, $a_{10} = a_8 + a_9$, $a_{12} = a_{13}$ и $a_3 = a_{11} = 0$, рассматриваемая модель сохраняет модифицированную норму

$$N_1 = \frac{1}{2} \sum_n (y_n y_+^* + y_n^* y_+). \tag{21}$$

Кроме этого, если только \mathbf{a}_7 отлично от нуля при всех остальных $\mathbf{a}_i = 0$, то сохраняется другой вид модифицированной нормы

$$N_2 = \frac{1}{2} \sum_n (y_n y_{n+2}^* + y_n^* y_{n+2}). \quad (22)$$

Далее, для произвольных \mathbf{a}_2 и \mathbf{a}_3^* , при $\mathbf{a}_1 = \mathbf{a}_4 + \mathbf{a}_6$, $\mathbf{a}_5 = \mathbf{a}_6$, $\mathbf{a}_4 = \mathbf{a}_5 + \mathbf{a}_7$, $\mathbf{a}_8 = \mathbf{a}_9 + \mathbf{a}_{10}$ и $\mathbf{a}_{11} = \mathbf{a}_{12} = \mathbf{a}_{13} = \mathbf{a}_{14} = 0$, модель сохраняет импульс определенный оператором

$$P_1 = i \sum_n (y_n y_+^* - y_n^* y_+). \quad (23)$$

Если же только \mathbf{a}_5 и \mathbf{a}_7 произвольны и отличны от нуля, а все остальные $\mathbf{a}_i = 0$, то сохраняется импульс определенный оператором

$$P_2 = i \sum_n (y_n y_{n+2}^* - y_n^* y_{n+2}). \quad (24)$$

Для произвольных $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_4$ и \mathbf{a}_6 , при $\mathbf{a}_2 = 2\mathbf{a}_3 = 2\mathbf{a}_8$ и при $\mathbf{a}_5 = \mathbf{a}_7 = \mathbf{a}_9 = \mathbf{a}_{10} = \mathbf{a}_{11} = \mathbf{a}_{12} = \mathbf{a}_{13} = \mathbf{a}_{14} = 0$, модель (17), (18) может быть получена из Гамильтониана

$$H = \sum_n \left\{ |y_n - y_+|^2 - \frac{\mathbf{a}_1}{2} |y_n|^4 - \frac{\mathbf{a}_6}{2} \left[(y_n^*)^2 y_+^2 + (y_+^*)^2 y_n^2 \right] - \mathbf{a}_4 |y_n|^2 |y_+|^2 - \frac{\mathbf{a}_1}{2} (|y_n|^2 + |y_+|^2) (y_+^* y_n + y_n^* y_+) \right\}, \quad (25)$$

с использованием уравнения движения

$$i\dot{y}_n^* = [y_n, H], \quad (26)$$

где скобки Пуассона определены следующим образом

$$[U, V] = \sum_n \left(\frac{dU}{dy_n} \frac{dV}{dy_n^*} - \frac{dU}{dy_n^*} \frac{dV}{dy_n} \right). \quad (27)$$

Таким образом, данная модель сохраняет энергию H .

В разделе 4.3.2. обсуждаются случаи, когда задача отыскания стационарных решений уравнения (17), (18) оказывается интегрируемой в том смысле, что она допускает сведение к двухточечному нелинейному отображению.

При помощи подстановки $y_n(t) = F_n \exp(-i\omega t)$ в ДНУШ, определенными выражениями (17) и (18), приходим к следующему разностному уравнению второго порядка

$$e \left[F_- - (2 - w/e) F_n + F_+ \right] + a_1 F_n^3 + g_1 F_n^2 (F_- + F_+) + g_2 F_n (F_-^2 + F_+^2) + g_3 F_- F_n F_+ + a_8 (F_-^3 + F_+^3) + g_4 F_- F_+ (F_- + F_+) = 0, \quad (28)$$

где для краткости записи введены следующие обозначения:

$$\begin{aligned} g_1 &= a_2 + a_3 + a_{11}, & g_2 &= a_4 + a_6 + a_{12}, \\ g_3 &= 2a_5 + a_7 + 2a_{13}, & g_4 &= a_9 + a_{10} + a_{14}. \end{aligned} \quad (29)$$

В частном случае

$$a_8 = g_4, \quad a_1 = g_2 = g_3, \quad 2a_1 + g_1 + 2a_8 = 1, \quad (30)$$

первый интеграл уравнения (28) сводится к двухточечному отображению

$$U(F_-, F_n, K) \equiv e \left[(F_-^2 + F_n^2) - (2 - w/e) F_- F_n \right] + a_1 (F_-^2 + F_n^2) F_- F_n + g_1 F_-^2 F_n^2 + a_8 (F_-^4 + F_n^4) + K = 0, \quad (31)$$

где K - константа интегрирования. Этот факт следует из возможности представления трехточечного разностного уравнения (28) в терминах двухточечной функции $U(F_-, F_n, K)$, определенной выражением (31), в виде

$$\frac{U(F_n, F_+, K) - U(F_-, F_n, K)}{F_+ - F_-} = 0. \quad (32)$$

Теперь очевидно, что если выполнено $U(F_-, F_n, K) = 0$, то выполнено и (28).

С другой стороны, если только g_1 и g_3 отличны от нуля, в то время как $a_1 = a_8 = g_2 = g_4 = 0$, то двухточечное отображение имеет вид

$$W(F_-, F_n, K) \equiv F_-^2 + F_n^2 - \frac{Y F_-^2 F_n^2}{2 - w/e} - 2Z F_- F_n - \frac{KY}{2 - w/e} = 0, \quad (33)$$

где K - константа интегрирования и

$$Z = \frac{(2 - w/e)^2 - K g_3^2}{2(2 - w/e) + 2K g_1 g_3}, \quad Y = 2g_1 Z + g_3. \quad (34)$$

В данном случае трехточечное разностное уравнение (28) может быть представлено в терминах двухточечной функции $W(F_-, F_n, K)$, определенной выражением (33), следующим образом:

$$\begin{aligned} & \frac{2-w/e}{2Z(F_+ - F_-)} \{W(F_n, F_+, K) - W(F_-, F_n, K)\} \\ & + \frac{g_3}{2-w/e} [F_+^2 W(F_-, F_n, K) - F_-^2 W(F_n, F_+, K)] = 0. \end{aligned} \quad (35)$$

Такое представление делает очевидным, что если выполнено $W(F_-, F_n, K) = 0$, то выполнено и (28). Отметим, что выражение (33) является отображением Квиспела-Робертса-Томпсона [3].

Важность двухточечных отображений состоит в том, что они позволяют получать точные решения соответствующих трехточечных уравнений итерационно, начиная с любого допустимого начального значения F_n или F_- . На каждом шаге итерации решается квадратное алгебраическое уравнение. Поскольку в качестве начального значения отображения может быть взято любое значение, лежащее в области допустимых значений, получаемые равновесные стационарные решения могут располагаться произвольно относительно решетки, а следовательно, такие решения соответствующих частных видов ДНУШ (17), (18) свободны от пПН.

В разделе 4.3.3. приводятся движущиеся точные решения уравнения (17), (18) в виде светлого и темного солитонов. Например, решение, описывающее светлый солитон, имеет вид

$$y_n = A \exp[-i(wt - kn + d)] \operatorname{sech}[b(n - vt + d_1)], \quad (36)$$

при условии, что выполнены следующие соотношения:

$$\begin{aligned} vb &= 2e s_1 S, & w &= 2e(1 - c_1 C), \\ 2x_6 C + x_5 &= 0, & [S^2 + (a_3 - a_2) A^2] s_1 &= 0, \\ 2x_2 C + x_4 &= 0, & A^2 (x_1 C - x_2 + x_3 / 2) &= e S^2 C c_1. \end{aligned} \quad (37)$$

Здесь d и d_1 - произвольные постоянные, A , w , k , b и v обозначают амплитуду, частоту, волновое число, обратную ширину и скорость солитонного решения, соответственно, и для краткости записи использованы следующие обозначения:

$$\begin{aligned}
S &= \sinh(b), & C &= \cosh(b), & T &= \tanh(b), \\
s_1 &= \sin(k), & s_2 &= \sin(2k), & s_3 &= \sin(3k), \\
c_1 &= \cos(k), & c_2 &= \cos(2k), & c_3 &= \cos(3k), \\
x_1 &= (a_2 + a_3)c_1 + a_{11}, & x_2 &= a_4 + a_6c_2 + a_{12}c_1, \\
x_3 &= 2a_3c_2 + a_7 + 2a_{13}c_1, & x_4 &= a_9c_3 + (a_{10} + a_{14})c_1, \\
x_5 &= a_9s_3 - a_{10}s_1 + a_{14}s_1, & x_6 &= a_6s_2 + a_{12}s_1.
\end{aligned} \tag{38}$$

Из первого условия в (37) следует, что скорость солитона обращается в нуль при $k = 0$ или $k = p$. В первом случае получаем незигзагообразный солитон, а во втором – зигзагообразный.

В разделе 4.3.4. показано, что ДНУШ (17), (18) допускает целый ряд точных решений с коротким периодом, а также ряд точных аperiodических решений.

В разделе 4.3.5. рассматриваются вопросы устойчивости некоторых точных решений ДНУШ (17), (18), в частности, светлого и темного солитонов. Показано, что и для светлых и темных солитонов существуют области параметров модели и параметров солитонов, где их движение устойчиво.

Таким образом, для рассмотренного обобщенного ДНУШ (17), (18) был найден ряд законов сохранения; описаны случаи, когда стационарное уравнение интегрируемо, то есть, может быть сведено к двухточечному нелинейному отображению; выписаны условия существования точных движущихся решений в виде светлого и темного солитонов; получен ряд точных стационарных короткопериодических и аperiodических решений; показано существование областей параметров модели и параметров солитонов, где их движение устойчиво.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Построены две дискретные модели Клейн-Гордона (ДМКГ1 и ДМКГ2) с асимметричным потенциалом. Модель ДМКГ1 является классической дискретизацией в то время как ДМКГ2 получена по методу дискретизированного первого интеграла [7]. Для статической задачи модели ДМКГ2 может быть получен первый интеграл, имеющий вид двухточечного нелинейного отображения. Статические кинковые решения могут быть найдены из этого отображения для любого допустимого начального значения. Этот факт говорит об отсутствии потенциала Пайерлса-Набарро в такой модели, поскольку равновесный кинк может быть размещен произвольно относительно решетки.

2. Показано, что свойства кинковых решений в ДМКГ1 и ДМКГ2 сильно отличаются, что можно объяснить наличием потенциала Пайерлса-Набарро в ДМКГ1 и его отсутствием в ДМКГ2. Кинк в ДМКГ2 имеет трансляционную моду с нулевой частотой для любого значения параметра дискретности h . ДМКГ1 имеет такую моду лишь при малых h . Наличие трансляционной моды у кинка в ДМКГ2 при любом h свидетельствует о повышенных транспортных свойствах этой дискретной модели. Кинки в ДМКГ2 не захвачены потенциалом Пайерлса-Набарро и, следовательно, они могут быть ускорены сколь угодно малым внешним полем.
3. При изучении ратчета кинка в ДМКГ2 под действием гармонической вынуждающей силы было показано, что при отсутствии вязкости, под действием гармонической внешней силы кинк движется равноускоренно. Ускорение кинка слабо зависит от параметра дискретности h . При приближении частоты внешней силы к частоте собственной колебательной моды, локализованной на кинке, ускорение кинка увеличивается на два порядка. При изучении ратчета кинка в ДМКГ2 с учетом вязкости было установлено, что дрейфовая скорость кинка меняется с положительной на отрицательную при коэффициенте вязкости выше некоторого значения.
4. Для обобщенного дискретного нелинейного уравнения Шредингера (ДНУШ) с кубической нелинейностью получены законы сохранения нормы, импульса и энергии; показаны случаи, когда задача отыскания стационарных решений интегрируема; выписаны точные движущиеся решения в виде светлого и темного солитонов и показано, что существуют области параметров, где солитоны устойчивы; получен ряд точных короткопериодических и аperiodических решений.

ЛИТЕРАТУРА

1. Тода М. Теория нелинейных решеток. Изд-во: М.: Мир. – 1984. – 262 С.
2. Ablowitz, M.J., Ladik, J.F. J. Math. Phys. 16, 598 (1975) 293, *ibid.* 17, 1011 (1976).
3. Quispel, G.R.W., Roberts, J.A.G., Thompson, C.J.: *Physica D* 34, 183 (1989).
4. *Encyclopedia of nonlinear science* / Edited by A. Scott. – New York: Routledge, 2005. – 1053 P.
5. Белова Т.И., Кудрявцев А.Е. Солитоны и их взаимодействия в классической теории поля // УФН. – 1997. – Т. 167. – №4. – С. 377-406.
6. Braun O.M., Kivshar Y.S. *The Frenkel-Kontorova model: concepts, methods, and applications*. – Berlin: Springer, 2004. – 472 P.

7. Dmitriev, S.V., Kevrekidis, P.G., Yoshikawa, N., Frantzeskakis, D.J.: Phys. Rev. E 74, 046609 (2006).
8. F. Marchesoni, Phys. Rev. Lett. 77, 2364 (1996).
9. Yu.S. Kivshar, D.E. Pelinovsky, T. Cretegny, M. Peyrard, Phys. Rev. Lett. 80, 5032 (1998).
10. Y. Zolotaryuk, M. Salerno, Phys. Rev. E 73, 066621 (2006).

Основные результаты диссертации изложены в следующих работах:

1. Пожидаева О.В., Дмитриев С.В., Медведев Н.Н., Бебихов Ю.В., Самсонов Ю.В., Старостенков М.Д. Локализованная колебательная мода в двумерном упорядоченном сплаве // Фундаментальные проблемы современного материаловедения, Барнаул. – 2007. – Т. 4. – № 4. – С. 102-107.
2. Бебихов Ю.В., Дмитриев С.В., Старостенков М.Д. Точные статические решения двух дискретных трансляционно-инвариантных моделей f^4 // Фундаментальные проблемы современного материаловедения, Барнаул. – 2007. – Т. 4. – № 4. – С. 7-12.
3. Бебихов Ю.В., Дмитриев С.В., Старостенков М.Д. Свойства трансляционно-инвариантных кинковых решений дискретных моделей f^4 // Фундаментальные проблемы современного материаловедения, Барнаул. – 2008. – Т. 5. – № 4. – С. 105-108.
4. Бебихов Ю.В., Старостенков М.Д. Подвижность кинков в трансляционно-инвариантных дискретных моделях f^4 // Материалы всероссийской научной конференции молодых ученых "Наука. Технологии. Инновации", 4-7 декабря 2008, г. Новосибирск. / Часть I. – 2008. – С. 65-66.
5. Бебихов Ю.В., Старостенков М.Д. Трансляционно-инвариантные дискретизации уравнения Клейн-Гордона // Тезисы докладов Всероссийской молодежной научной конференции «Мавлютовские чтения», 28-29 октября 2008 г. Уфа. / Уфа. – 2008. – С. 112;
6. Бебихов Ю.В. Дискретное уравнение Шредингера с кубической нелинейностью, допускающее точные решения. 9-я Международная научно-практическая конференция 12-13 декабря 2008, г. Барнаул. Изд-во Алтайского госуд. техн. ун-та. – 2008. – С. 76.
7. Дмитриев С.В., Кхаре А., Сучков С.В., Бебихов Ю.В. Ратчет кинка в дискретной модели Клейн-Гордона свободной от потенциала Пайерлса-Набарро // Фундаментальные проблемы современного материаловедения, Барнаул. – 2009. – Т. 6. – № 1. – С. 90-95.
8. Бебихов Ю.В., Дмитриев С.В., Кхаре А. Законы сохранения и точные стационарные решения обобщенного дискретного нелинейного уравнения Шредингера // Фундаментальные проблемы современного материаловедения, Барнаул. – 2009. – Т. 6. – № 3. – С. 55-58.

9. Бебихов Ю.В., Дмитриев С.В., Самсонов Ю.В., Старостенков М.Д. Моделирование сетки дислокаций несоответствия на границе медь/сапфир // Вестник СибГУТИ. – 2009. – № 3. – С. 23-31.
10. Бебихов Ю.В., Дмитриев С.В., Сучков С.В., Старостенков М.Д. Ратчет кинков в дискретной цепочке без потенциала Пайерлса-Набарро // Тезисы докладов Международного симпозиума «Перспективные материалы и технологии», 25-29 мая 2009, Витебск, Беларусь. – С. 175.
11. Сучков С.В., Бебихов Ю.В., Дмитриев С.В. Влияние вязкого трения на ратчет кинка в дискретной модели Клейн-Гордона свободной от потенциала Пайерлса-Набарро // Фундаментальные проблемы современного материаловедения, Барнаул. – 2009. – Т. 6. – № 4. – С. 109-113.
12. Бебихов Ю.В., Дмитриев С.В. Моделирование несоразмерной фазы в 2D модели с частицами конечных размеров // Сборник трудов X Международной научно-технической уральской школы-семинара металловедов – молодых ученых, 7-11 декабря 2009, г. Екатеринбург / Екатеринбург. – 2009. – С. 199-201.
13. Bebikhov Yu.V., Dmitriev S.V., Suchkov S.V., Khare A. Effect of damping on kink ratchets in the Klein–Gordon lattice free of the Peierls–Nabarro potential. – Physics Letters A. – 2010. – V. 374. – P. 1477-1480.
14. Баимова Ю.А., Бебихов Ю.В., Дмитриев С.В., Кхаре А., Потекаев А.И. Трансляционно-инвариантные кинковые решения дискретных моделей f^4 // Изв. вузов. Физика. – 2010. – №3. – С. 46-54.

Подписано в печать 26.02.10 г. Формат 60x84 1/16

Печать – ризография. Усл.п.л. 2,0.

Тираж 100 экз. Заказ 2010-14

Отпечатано в типографии АлтГТУ

656038, г. Барнаул, пр-т Ленина, 46

Лицензия на полиграфическую деятельность

ПЛД № 28-35 от 15.07.1997 г.