УДК 538.913-405

КОНЕЧНО-РАЗНОСТНОЕ РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ SIN-ГОРДОНА, МОДЕЛИРУЮЩЕЕ ДИСЛОКАЦИОННЫЕ ПЕТЛИ В МОДЕЛИ КРИСТАЛЛА ФРЕНКЕЛЯ-КОНТОРОВОЙ

Науман Л.В., Дмитриев С.В., Старостенков М.Д. (Барнаул)

Abstract

In the frame of one-dimensional Frenkel-Kontorova cristal model the interaction between breathers and kinks has been studied. It was shown that there was a narrow domain of breather's parameters where the interaction is accompaned by convertiong energy from kinetic form to potential form on some condition this exchange of energy may lead to formation kink-antikink pairs from breathers. The kink present a dislocation within the Frenkel-Kontorova model.

Модель Френкеля-Конторовой является классической моделью для изучения свойств твердых тел. В рамках классической модели описано взаимодействие между прямолинейными дислокациями, релятивистское сокращение ширины дислокации [1]; оценено влияние параметров кристалла на энергию и ширину дислокации, барьер Пайерлса [2].

В длинноволновом приближении она описывается хорошо изученным нелинейным уравнением sin-Гордона, для которого получен ряд решений в аналитической форме. Дискретность модели в связи с этим оставалась как бы в тени. Однако ряд интересных физических эффектов связан именно с дискретностью модели, причем роль дискретности существенно возрастает при описании дислокаций малой ширины. Уравнения модели Френкеля-Конторовой могут рассматриваться как результат малого возмущения уравнения sin-Гордона. Они относятся к классу не вполне интегрируемых уравнений. Известны многочисленные исследования поведения солитонных решений таких уравнений, часть из которых обсуждается, например, в обзоре [3]. Основное отличие динамики солитонных решений подобных уравнений состоит в возможности их неупругого взаимодействия. В настоящей работе показано, что в модели Френкеля-Конторовой такая возможность реализуется.

Модель Френкеля-Конторовой описывает движение прямолинейной цепочки атомов, расположенных в косинусоидальном потенциальном рельефе амплитуды А. Масса атома m, наименьшее межатомное расстояние a. Каждой потенциальной яме соответствует обрывающаяся атомная полуплоскость нижней части кристалла, каждому атому - обрывающаяся полуплоскость верхней части кристалла. Между ближайшими атомами действуют упругие силы, вызывающие отталкивание на расстояниях, меньших a, и притяжение на больших расстояниях. Эти силы осуществляются посредством линейно-упругих связей жесткости c.

Уравнение движения n-го атома

$$m\frac{du_n}{2} = c\left(u_{n-1} - 2u_n + u_{n+1}\right) - \left(2\pi A/a\right) sin\left(2\pi u_n/a\right) \tag{1}$$

где $u_n = u(x_n)$ - отклонение n-го атома от равновесного положения, $x_n = an$ - координата n-го атома в невозмущенной цепочке.

Введением новых переменных φ и τ уравнение (1) приводится к стандартной форме уравнения sin-Гордона:

$$\varphi_{\tau\tau} - \varphi_{\xi\xi} + \sin\varphi = 0, \tag{2}$$

причем параметры подбирались таким образом, чтобы уравнение (2) для широкого спектра решений давало хорошее приближение дискретной модели (1), а с другой стороны, чтобы уже в достаточной мере проявлялись некоторые нетривиальные эффекты дискретности модели Френкеля-Конторовой [4].

Известен ряд аналитических решений уравнения (2) [5,6]. Одно из них, называемое кинком (антикинком), представляет дислокацию в модели Френкеля-Конторовой:

$$\varphi_I = 4\,\mathrm{arctg}\left[\exp\left(\pm\gamma\left(\xi - \xi_0 + f\left(\tau - \tau_0\right)\right)\right)\right], \tag{3}$$

где $0 \le f \le 1$ - параметр, задающий скорость кинка, $\gamma = \left(1 - f^2\right)^{-1/2}$, величина ξ_0 характеризует положение кинка в момент времени $\tau = \tau_0$.

Данное решение, называемое бризером, моделирует нелинейное возмущение в рассматриваемой модели:

$$\varphi = 4\mathrm{arctg}\frac{\eta \sin\left[\delta\omega\sigma\left(\left(\tau - \tau_0\right) - \left(\xi - \xi_0 + d\tau_0\right)\right)\right]}{\omega\, \mathrm{ch}\left[\delta\eta\sigma\left(\left(\xi - \xi_0 + d\tau_0\right) - \left(\tau - \tau_0\right)\right)\right]}, \tag{4}$$

где $0 \le d \le 1, 0 \le \omega \le 1$ - параметры, определяющие скорость движения и амплитуду колебаний бризера соответственно: $\delta = (1 - d^2)^{-1/2}$, $\eta = (1 - \omega^2)^{1/2}$; ξ_0, τ_0 определяют соответственно положение и фазу бризера в начальный момент времени; $\sigma > 0$.

В настоящей работе в рамках модели кристалла Френкеля-Конторовой проводится анализ взаимодействия:

a) двух бризеров, движущихся навстречу друг другу с равными по модулю скоростями. В такой постановке можно решать задачу, рассматривая только один из бризеров, накладывая на одном конце цепочки граничные условия зеркальной симметрии, а на другом - условия равенства смещений атомов нулю;
b) бризера и кинка, движущихся навстречу друг другу. В этом случае на обеих концах цепочки накладывались условия равенства смещений атомов нулю;
c) двух кинков, движущихся навстречу друг другу с равными по модулю скоростями. В данном случае граничные условия соответствуют серии экспериментов а).

Для интегрирования системы уравнений (1) использовался метод Штермера различных порядков точности [7]. В широких пределах варьировался шаг интегрирования по времени с целью выбора его оптимального значения. Критерием точности счета являлось сохранение энергии кристалла с течением времени.

Начальные условия определялись из выражений (3,4), где для конкретных бризера и кинка задавались скорости, амплитуда колебаний бризера и расстояние между взаимодействующими квазичастицами в начальный момент времени.

Исследовано максимальное отклонение атомов в процессе взаимодействия:

a) двух бризеров;
b) бризера и кинка;
c) двух кинков,

а также амплитуды квазичастиц после взаимодействия в зависимости от расстояния между ними в начальный момент времени. Эксперименты показали, что максимальное отклонение атомов в процессе взаимодействия двух бризеров, а также бризера и кинка - периодическая функция с периодом, равным длине волны бризера λ. В окрестности точки перегиба наблюдается резкое изменение амплитуд и скоростей квазичастиц после взаимодействия, во всей остальной области результатом взаимодействия является лишь сдвиг фаз бризеров. Изменение амплитуд и скоростей происходит в результате перехода энергии из одной формы в другую.

Продемонстрируем влияние степени дискретности модели на характер взаимодействия бризеров.

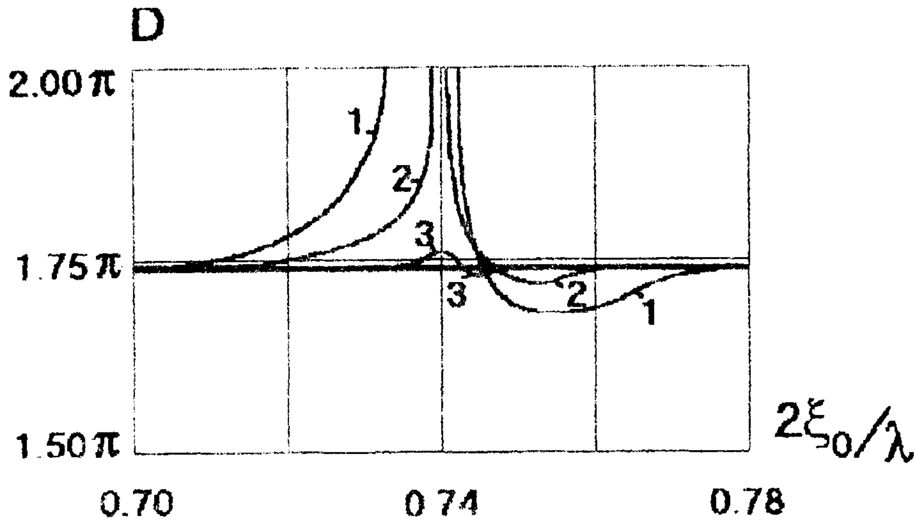

Рис.1. Зависимость амплитуды бризеров после взаимодействия от относительного расстояния между ними в начальный момент времени.

Кривые 1,2,3 на рис. 1 представляют зависимость амплитуды колебания бризера с зеркально симметричным бризером от $2\xi_0/\lambda$ полученнную при следующих значениях шага аппроксимации h: $0.5\pi \cdot 10^{-3/2}$, $\pi \cdot 10^{-3/2}$, $2\pi \cdot 10^{-3/2}$. Горизонтальная прямая отвечает амплитуде бризера до взаимодействия. При значении $h = 0.5\pi \cdot 10^{-3/2}$ изменения амплитуды бризеров в результате взаимодействия практически не происходит. При значении $h = \pi \cdot 10^{-3/2}$ появляется узкая область, где происходит весьма сильное изменение амплитуды. При $h = 2\pi \cdot 10^{-3/2}$ ширина этой области возрастает, оставаясь все же много меньшей *1*. Кривые 2,3 на рис. 1 имеют область, где амплитуда бризеров после взаимодействия не определена. Здесь происходит качественное изменение в поведении квазичастиц, не описываемое уравнением (2). А именно, пара провзаимодействовавших бризеров порождает либо две пары кинк-антикинк, либо одну пару кинк-антикинк и покоящийся бризер. Пара кинк-антикинк моделирует в данной модели дислокационную петлю. Дислокации предпочтительно образуются при взаимодействии бризеров с достаточно большими амплитудами. Чем выше скорость бризеров, тем это требование жестче. При взаимодействии бризера и кинка обнаружены реакции с образованием трех дислокаций (при больших значениях амплитуды бризера) и отталкивание бризера и кинка.

При взаимодействии двух кинков максимальное отклонение атомов от положения равновесия - постоянная функция во всей исследованной области, и амплитуда кинков после реакции не изменяется.

Система уравнений (1) обратима во времени. Это означает, что возможны реакции взаимодействия четырех дислокаций или пары дислокаций и покоящегося бризера с образованием двух разбегающихся бризеров. Эти реакции не описываются уравнением (2), которое предсказывает сохранение числа дислокаций в кристалле [5].

Введенный параметр - максимальное отклонение атомов в процессе взаимодействия - выявляет положение сепаратрисы, разделяющей области фазового пространства с разным поведением атомов в процессе реакции. В одной области происходит переход кинетической энергии в потенциальную, в другой - потенциальной в кинетическую. Изменение степени дискретности приводит к изменению области перераспределения энергий. Дискретность играет в модели роль высокочастного потенциала, амплитуда которого имеет тот же порядок, что и амплитуда непрерывного. Влияние высокочастотных поправок мало всюду, за исключением областей в окрестности сепаратрис, где под их влиянием происходит качественное изменение в поведении квазичастиц.

Найдем собственные колебания цепочки длиной в N атомов в предположении, что все атомы с одинаковой частотой колеблются около своего положения равновесия. Можно ожидать, что колебания имеют форму волн:

$$u_n = B\exp\left\{2i(kbn - \omega t)\right\}. \qquad (5)$$

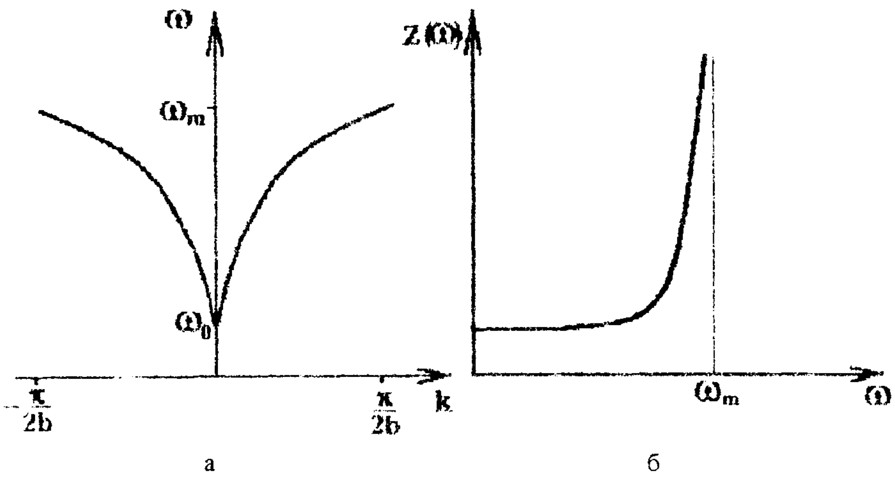

Рис.2. Спектр частот (а) и число частот (b) собственных колебаний атомов

Подставляя (5) в дискретное уравнение движения атомов (1), находим, что частота собственных колебаний атомов в кристалле является функцией k (рассматриваются только положительные частоты) и имеют форму волн, проходящих по цепи:

$$\omega = \sqrt{\omega_0^2 - \frac{c}{m}\sin^2 ka}\text{, где } \omega_0 = \frac{\pi}{a}\sqrt{\frac{A}{m}}.$$

Из формулы (2) видно, что диапазон значений k ограничен интервалом $-\frac{\pi}{2b} < k < \frac{\pi}{2b}$.

Зависимость $\omega(k)$ представлена на рис. 2,а.

Число частот собственных колебаний

$$z(\omega)=\frac{2N}{=\sqrt{\omega_m^2-\omega^2}\sqrt{1+\omega_0^2/(\omega^2-\omega_0^2)}},\ \text{где}\ \omega_m^2=\sqrt{\omega_0^2-\frac{c}{m}\sin^2 ka}$$

представлено на рис. 2,b.

Обнаружено, что бризеры образуются во всем интервале частот собственных колебаний, что свидетельствует о возможности образования бризеров в результате собственных тепловых колебаний атомов. Реакции с преобразованием бризерных мод колебаний в кинки наблюдаются в нижней части спектра $z(\omega)$. Данный механизм образования дислокаций возможен при мартенситных превращениях.

Библиографический список

1. Орлов А.Н. Введение в теорию дефектов в кристаллах. -М.: Высшая школа. 1983. - 144 с.
2. Браун О.М., Зеленская И.И., Кившарь Ю.С // Поверхность. Физика, химия, механика.- 1991.- N8.- С. 22-26.
3. Kivshar Y.S., Malomed B.A. Dinamics of solitons in nearly integrable systems//Reviews of Modern Physics.- 1989.- V. 61. N4.- P. 763-915.
4. Дмитриев С.В., Науман Л.В., Старостенков М.Д.// Изв. вузов. Физика.- 1996.- N2.- С. 72-76.
5. Додд Р., Эйлбек Дж., Гиббон Дж., Моррис Х. Солитоны и нелинейные волновые уравнения. -М.: Мир, 1988. - 694 с.
6. Захаров В.Е., Тахтаджян Л.А., Фадеев Л.Д. Полное описание решений "sin-Гордон" уравнения// ДАН СССР.- 1974.- Т. 219. N6.- С. 1334-1337.
7. Хайрер Э., Нерсетт С., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи. - М.: Мир, 1990. - 512 с.