

Олег М. Браун, Юрий С. Кившарь

Модель Френкеля-Конторовой

Концепции, методы и приложения

Physics – Monograph
(Editorial W. Beiglböck)

26 октября 2008 г.

Springer

Посвящается нашим родителям и нашим семьям

Предисловие

Теоретическая физика имеет дело с физическими моделями. *Простота и универсальность* являются главными требованиями, которым должна удовлетворять хорошая физическая модель. Универсальные модели, способные описать большое разнообразие различных физических явлений, встречаются редко и поэтому они имеют ключевое значение. Такие модели привлекают особое внимание, так как они позволяют дать наиболее простое описание физических концепций. Эти модели на протяжении многих лет появляются снова и снова в самых разнообразных формах, увеличивая их область применения и их значение для обучения. Самым простым примером такой модели является маятник. Эта универсальная модель служит парадигмой, которая охватывает основные особенности различных физических систем и появляется во многих задачах с очень разным физическим содержанием.

Твердые тела обычно описываются сложными моделями с большим числом степеней свободы и, следовательно, с достаточно сложными соответствующими "микроскопическими" уравнениями. Однако в наше время относительно простая модель, сейчас известная как *модель Френкеля-Конторовой*, стала одним из фундаментальных и универсальных инструментов низкоразмерной нелинейной физики. Эта модель описывает цепочку классических частиц, связанных со своими соседями, взаимодействующую с периодическим потенциалом подложки. Хотя связь с этой классической формулировкой в различных явлениях часто не проявляется явно, но множество различных нелинейных моделей, описывающих динамику дискретных нелинейных решеток, основаны, непосредственно или косвенно, на ней. Классическая модель Френкеля и Конторовой была предложена в 1938 году для описания структуры и динамики кристаллической решетки около ядра дислокации. Это один из первых примеров в физике твердого тела, когда в рамках простой одномерной модели была промоделирована динамика протяженного в объеме дефекта. За прошедшие годы, подобные идеи были использованы во многих различных физических задачах, тем самым обеспечивая их связь с математической теорией солитонов, которая была позже развита для континуального аналога модели Френкеля-Конторовой (ФК).

В континуальном приближении модель ФК сводится к *точно интегрируемому уравнению синус-Гордон* (СГ). Это объясняет, почему в нелинейной физике данная модель привлекает такое большое внимание. Уравнение СГ является примером фундаментальной нелинейной модели, для которой мы знаем практически все о динамике ее нелинейных возбуждений. Многочастичная динамика этих возбуждений, а именно *фононов*, *кинков* (топологических солитонов) и *бризеров* (динамических солитонов), определяет глобальное поведение нелинейной системы как целого. Использование языка этих нелинейных мод позволяет получить глубокое физическое понимание нелинейной динамики модели ФК, рассматривая ее как систему слабо взаимодействующих эффективных квазичастиц, несмотря на то, что сама модель по построению является *дискретной* и неинтегрируемой. Дискретность модели ФК проявляется в таком явлении как существование эффективного потенциального рельефа, известного как потенциал Пейрлса-Набарро.

Простота модели ФК, обусловленная использованием гармонического приближения для межатомных сил и синусоидального потенциала подложки, так же как и её удивительное богатство и способность описать широкий диапазон различных явлений, привлекает большое внимание исследователей, работающих в области физики твердого тела и нелинейной динамики. Многие важные физические явления, от солитонов до хаоса, от соизмеримых и несоизмеримых фаз до стеклоподобного поведения, являются сложными отдельными областями физики, каждая из которых заслуживает отдельной книги. Однако модель ФК дает уникальную возможность объединить многие такие концепции и проанализировать их в рамках одного унифицированного непротиворечивого подхода.

Основной задачей настоящей книги является описание, с наиболее общей точки зрения, *основных концепций и методов низкоразмерной нелинейной физики*, основанное на модели ФК и её обобщениях. Мы не ограничиваемся спецификой конкретных явлений, но вместо этого попытаемся представить *панорамный взгляд* на общие свойства и динамику моделей твердого тела и просуммировать результаты, включающие фундаментальные физические концепции.

Глава 1 служит введением в классическую модель ФК, а в главе 2 уже приводится более детальное обсуждение приложений модели ФК к физическим системам разного типа. В главе 3 мы вводим одну из самых важных концепций - понятие кинка, и описываем характеристики его движения в дискретной цепи, когда он взаимодействует с периодическим потенциалом Пейерлса-Набарро. В главе 4 мы анализируем другой тип нелинейной моды - пространственно локализованных осциллирующих состояний, часто называемых *внутренними локализованными модами* или *бризерами*. Мы покажем, что эти нелинейные моды можно рассматривать как обобщение синус-Гордоновских бризеров для случая с сильной дискретностью. Главы 3 и 4 также дают краткий обзор динамических свойств обобщенных цепей ФК, в которых используются более общие типы потенциала подложки и учитывается ангармоничность взаимодействия между частицами цепи. В этих главах также обсуждается влияние неоднородностей цепи на динамику кинков и на динамику и структуру нелинейных примесных мод. В главе 5 дается простое введение в физику соизмерных и несоизмерных систем и обсуждается структура основного состояния дискретной цепи ФК. Мы показываем, что модель ФК дает, вероятно, самый простой подход для описания систем с двумя и более конкурирующими пространственными периодами. В то время как взаимодействие между атомами способствует их равноудаленному расположению с периодом, соответствующим минимуму потенциала межатомного взаимодействия, взаимодействие атомов с потенциалом подложки (имеющим собственный период) способствует формированию конфигурации, в которой они регулярно сгруппированы. В главе 5 мы используем два метода для описания свойств модели ФК: сначала применяем континуальное приближение для описания дискретной модели точно интегрируемым уравнением синус-Гордон, а затем изучаем уравнения для стационарных состояний дискретной модели ФК, сводя их к так называемому *стандартному отображению*, которое является одним из классических инструментов стохастической теории. Статистическая механика модели ФК обсуждается в главе 6, в которой также приведены основные результаты метода трансфер-интеграла. Здесь снова проявляется уникальность модели ФК, так как с одной стороны она позволяет получить точные результаты в одномерном случае, а с другой - позволяет ввести слабо взаимодействующие квазичастицы (кинки и фононы) для описания статистической механики систем сильно взаимодействующих частиц. В главе 7 дается краткий обзор динамических свойств модели ФК при ненулевой температуре, включая диффузию кинков и перенос массы в нелинейных дискретных системах. В главе 8 обсуждается динамика нелинейных цепей под действием постоянных и переменных сил, когда система находится в состоянии, далеком от равновесного. В главе 9 обсуждается ратчет динамика, т.е. динамика систем при нарушенной пространственной и временной симметрии, когда в силу этого в системе возникает направленное движение. Свойства конечных фрагментов цепей обсуждаются в главе 10, а двумерные обобщения модели ФК вводятся и описываются в главе 11 для скалярных и векторных моделей. В завершающей главе 12 мы приводим примеры, где основные концепции и физические эффекты, продемонстрированные выше для простых версий цепи ФК, могут найти применение в более широком контексте. Самая последняя глава, написанная *проф. Альфредом Сегюром*, являющимся одним из пионеров в изучении модели ФК и её приложений, содержит некоторые интересные исторические замечания.

Мы благодарим наших многочисленных коллег и друзей со всего земного шара, которые сотрудничали с нами при решении различных вопросов, связанных с этой книгой, или внесли вклад в наше понимание этой области. Невозможно привести их полный список, но мы выделим тех, кому особенно обязаны: А.Р. Бишоп (A.R. Bishop), Л.А. Большов, Д.К. Кэмпбэлл (D.K. Campbell), Т. Доксуа (T. Dauxois), С.В. Дмитриев, С. Флах (S. Flach), Р.В. Гриффитс (R.V. Griffiths), Б.А. Иванов, А.М. Косевич, А.С. Ковалев, И.Ф. Люксютов, Б.А. Маломед, А.Г. Наумовиц, М.В. Палий, М. Пейрар (M. Peyrard), М. Ремуасне (M. Remoissenet), Дж. Рёдер (J. Röder), А. Сегюр (A. Seeger), С. Такено (S. Takeno), Л. Тенг (L.H. Tang), А.В. Устинов, И.И. Зеленская и А.В. Золотарюк.

Сокращения

DW	двухъямный (потенциал подложки)
ДС	доменная стенка
DB	двухбарьерный (потенциал подложки)
DSG, ДСГ	двойной синус-Гордон (уравнение)
ФПК	Фоккера-Планка-Крамерса (уравнение)
FK, ФК	Френкеля-Конторовой (модель)
ФвдМ	Франка-ван-дер-Мерве (предел)
GS	основное состояние
IC	несоизмеримая (фаза)
LJ	Леннарда-Джонса (потенциал)
NS	несинусоидальный (потенциал подложки)
SG, СГ	синус-Гордон (уравнение)
ТИ	трансфер-интеграла (метод)
B	подвижность
D	коэффициент диффузии (D_k , D_η , D_a , D_s , D_μ , D_c)
E	(полная) энергия системы
F	свободная энергия; сила
G	Свободная энергия Гибса; функция Грина
H	Гамильтониан
J	поток атомов
K	кинетическая энергия; матрица передачи; постоянная Чирикова
L	длина цепочки
M	число ям потенциала подложки; функция памяти
N	число атомов, кинков, бризеров
P	импульс кинка; параметр несоответствия
Q	корреляционная функция; число атомов в одном периоде кноидальной волны
R	расстояние между кинками
S	энтропия
T	температура; отображение Чирикова
U	полная потенциальная энергия (U_{sub} , U_{int})
V	потенциальная энергия (V_{sub} , V_{int} , V_{PN})
W	энтальпия
X	координата кинка
Y	статистическая сумма $Y(T, \Pi, N)$; координата центра масс; точка на торе
Z	статистическая сумма $Z(T, L, N)$
a	период решетки (a_s , a_A , a_{min} , a_{FM})
c	скорость звука
d	ширина кинка
f	сила; функция распределения
g	постоянная упругости (g_{Aubry} , g_a , g_k)
h	параметр дискретности; функция остова; функция перенормировки
j	плотность потока
k	момент; модуль (эллиптической функции); волновой вектор
l	индекс атома
m	масса кинка

n	концентрация кинков ($n_{\text{tot}}, n_k, n_w, n_{\text{pair}}$)
q	период С-фазы
r	используется при определении параметра соразмерности $w = r/s$
s	число атомов в элементарной ячейке, $\theta = s/q$; энтропия на частицу; спин
t	время
u	смещение атома
v	скорость кинка; потенциал взаимодействия между кинками v_{int}
w	смещение; параметр соразмерности $w = r/s$
x	координата атома
α	параметр ангармонизма
β	множитель Больцмана $\beta \equiv (k_B T)^{-1}$
β	параметр экспоненциального взаимодействия
γ	множитель Лоренца; постоянная Эйлера
δ	фазовый сдвиг (при столкновении кинков)
ε	энергия ($\varepsilon_s, \varepsilon_k, \varepsilon_{\text{pair}}, \varepsilon_{PN}$)
ψ	параметр порядка
κ	момент фонона; параметр потенциала Морса
χ	восприимчивость; малое смещение
λ	собственные значения
ξ	корреляционная длина; каноническая переменная
μ	химический потенциал
η	коэффициент трения; функция Блоха
ρ	плотность (атомов, фононов, кинков)
τ	безразмерная температура $\tau = k_B T / \varepsilon_k$
θ	безразмерная концентрация (покрытие), $\theta = N/M = s/q$
ω	частота
ω_{min}	минимальная частота фононов закрепленной ФК цепи
σ	топологический заряд кинка
ϵ	собственные значения
Γ	фазовый объем
Δ	щель в спектре
Π	давление
Ξ	большая статистическая сумма $\Xi(T, L, \mu)$
Ω	число состояний; разделение фазового пространства; функция Мори
Θ	ступенчатая функция
$\mathcal{N}$	функция отклика
$\mathcal{L}$	оператор Лиувилля
$\mathcal{P}$	оператор проекции

Оглавление

Введение	1
1.1 Модель Френкеля-Конторовой	1
1.2 Уравнение синус-Гордон	3
Физические Модели	7
2.1 Общий подход	7
2.2 Механическая модель	8
2.3 Динамика дислокаций	9
2.4 Поверхности и слои адсорбированных атомов	10
2.5 Несоизмеримые фазы в диэлектриках	12
2.6 Краудионы и дефекты решетки	13
2.7 Магнитные цепи	15
2.8 Джозефсоновские контакты	16
2.9 Нелинейные модели динамики ДНК	17
2.10 Цепи водородных связей	18
2.11 Модели граничного скольжения	20
Кинки	21
3.1 Потенциал Пейерлса-Набарро	21
3.2 Динамика кинков	25
3.2.1 Эффективное уравнение движения	25
3.2.2 Движущиеся кинки	27
3.2.3 Захваченные кинки	28
3.2.4 Кратные кинки	29
3.3 Потенциал подложки общего вида	31
3.3.1 Основные свойства	31
3.3.2 Внутренние моды кинка	33
3.3.3 Несинусоидальный потенциал подложки	35
3.3.4 Многоямный потенциал	38
3.3.5 Многобарьерный потенциал	41
3.4 Неупорядоченные подложки	43
3.4.1 Эффективное уравнение движения	44
3.4.2 Точечные дефекты	47
3.4.3 Внешняя неоднородная сила	47
3.5 Ангармоническое межатомное взаимодействие	49
3.5.1 Короткодействующее взаимодействие	50
3.5.2 Невыпуклые межатомные потенциалы	53
3.5.3 Взаимодействие Кац-Бакера	58
3.5.4 Дальнодействующее взаимодействие	60
3.5.5 Компактоны-кинки	62

Бризеры	65
4.1 Возмущенные бризеры уравнения синус-Гордон	65
4.1.1 Высоко-амплитудные бризеры	65
4.1.2 Мало-амплитудные бризеры	67
4.2 Столкновения бризеров	67
4.2.1 Много-солитонные эффекты	69
4.2.2 Фрактальное рассеяние	69
4.2.3 Холодный газ солитонов солитон!холодный газ	71
4.3 Примесные моды	73
4.3.1 Структура и устойчивость	73
4.3.2 Взаимодействие солитонов с примесями	76
4.4 Дискретные бризеры	79
4.4.1 Общие замечания	79
4.4.2 Существование и устойчивость	80
4.4.3 Дискретное уравнение НШ	81
4.4.4 Темные бризеры	85
4.4.5 Ротобризеры	87
4.5 Двухмерные бризеры	88
4.6 Физические системы и приложения	90
Основное состояние	93
5.1 Основные свойства	93
5.2 Цепочка с фиксированной плотностью	98
5.2.1 Соразмерные конфигурации	98
5.2.2 Несоразмерные конфигурации	105
5.3 Цепочка со свободными концами	109
5.3.1 Переход Франка-ван-дер-Мерве	110
5.3.2 Дьявольская лестница и фазовая диаграмма	112
5.4 Обобщения ФК модели	114
5.4.1 Потенциал подложки общей формы	115
5.4.2 Анггармонический межатомный потенциал	117
5.4.3 Невыпуклое взаимодействие	121
Статистическая физика	129
6.1 Вводные замечания	129
6.2 Общий формализм	130
6.3 Предел слабых связей: стеклоподобные свойства	133
6.3.1 Модель Изинга	134
6.3.2 Конфигурационные возбуждения	135
6.3.3 Двухуровневые системы и теплоемкость	138
6.4 Предел сильной связи: Газ квазичастиц	139
6.4.1 Бризеры и разделение фазового пространства	141
6.4.2 Кинк-фононное взаимодействие	142
6.4.3 Кинк-кинковое взаимодействие	144
6.4.4 Эффекты дискретности	145
6.5 Статистическая механика ФК цепи	145
6.5.1 Метод трансфер-интеграла	145
6.5.2 Уравнение Шредингера	149
6.5.3 Восприимчивость	150
6.5.4 Иерархия решеток суперкинков	154
6.5.5 Равновременные корреляционные функции	155
6.5.6 Обобщенные ФК модели	158
Термализованная динамика	163
7.1 Основные концепции и формализмы	163
7.1.1 Основные формулы	164
7.1.2 Метод Мори	166
7.1.3 Коэффициенты диффузии	167
7.1.4 Невзаимодействующие атомы	169

7.1.5	Взаимодействующие атомы	170
7.2	Диффузия кинка	172
7.2.1	Уравнение Ланжевена	173
7.2.2	Внутренняя вязкость	176
7.2.3	Аномальная диффузия	177
7.2.4	Коэффициент диффузии кинков	178
7.3	Динамическая корреляционная функция	180
7.4	Транспорт массы	183
7.4.1	Диффузия в однородном газе	183
7.4.2	Приближенные методы	185
7.4.3	Феноменологический подход	188
7.4.4	Коэффициент самодиффузии	190
7.4.5	Свойства коэффициентов диффузии	191
Вынужденная динамика		195
8.1	Вводные замечания	195
8.2	Нелинейный отклик невзаимодействующих атомов	196
8.2.1	Предел сильного трения	196
8.2.2	Предел слабого трения	197
8.3	Модель ФК в пределе сильного трения	201
8.4	Вынужденное движение кинка	204
8.5	Неустойчивость быстрых кинков	206
8.6	Сверхзвуковые кинки и многокинковые структуры	212
8.7	Переход из закрепленного в скользящее состояние	216
8.7.1	Соразмерные основные состояния	216
8.7.2	Сложные основные состояния и многошаговый переход	216
8.8	Гистерезис	219
8.9	Транспортные пробки	220
8.10	Периодические силы: диссипативная динамика	223
8.11	Действие периодической силы на систему со слабым трением	225
Ратчеты		229
9.1	Предварительные замечания	229
9.2	Различные типы Ратчетов	230
9.2.1	Суперсимметрия	230
9.2.2	Диффузионные ратчеты	231
9.2.3	Инерционные ратчеты	236
9.3	Солитонные ратчеты	238
9.3.1	Условия симметрии	238
9.3.2	Ратчеты качения	238
9.3.3	Пульсирующие ратчеты	240
9.4	Экспериментальные реализации	242
Цепочки конечной длины		245
10.1	Общие замечания	245
10.2	Основные состояния и спектр возбуждений	246
10.2.1	Стационарные состояния	246
10.2.2	Континуальное приближение	247
10.2.3	Дискретная цепочка	248
10.2.4	Спектр колебаний	249
10.3	Динамика конечной цепочки	251
10.3.1	Гусенично-подобное движение	251
10.3.2	Адиабатические траектории	251
10.3.3	Диффузия коротких цепочек	254
10.3.4	Стимулированная диффузия	255
10.4	Случай невыпуклого потенциала	256

Двухмерные модели	257
11.1 Предварительные замечания	257
11.2 Скалярные модели	258
11.2.1 Статистическая физика	261
11.2.2 Динамические свойства	262
11.3 Модель зигзага	263
11.3.1 Основное состояние	264
11.3.2 Переходы Обри	266
11.3.3 Классификация кинков	267
11.3.4 Кинки зигзаг-модели	271
11.3.5 Приложения	275
11.4 Двухмерная векторная модель пружинки-шарики	277
11.4.1 Основное состояние	278
11.4.2 Спектр возбуждений	280
11.4.3 Динамика	280
11.5 Векторная 2D ФК модель	281
11.5.1 Переход от захвата к скольжению	282
11.5.2 “Плавкий предохранитель” на атомном уровне	285
Заключение	287
Исторические замечания	291
Список литературы	295

Введение

Эта вводная глава предназначена для того, чтобы дать общий краткий обзор классической модели Френкеля-Конторовой и её континуальной версии – уравнения синус-Гордон. В главе также вводятся фундаментальные моды модели: фононы, кинки, бризеры и описываются их основные свойства. Это создает основу для последующего обсуждения основных физических систем, в которых нелинейная динамика описывается моделью ФК и её обобщениями.

1.1 Модель Френкеля-Конторовой

Простая модель, описывающая динамику цепи частиц, взаимодействующих с ближайшими соседями в присутствии некоторого внешнего периодического потенциала, впервые была приведена Прандлом [1] и Делингером [2] – см. исторический очерк профессора Альфреда Сегюра в конце этой книги (Глава 13). Эта же модель независимо была введена Френкелем и Конторовой [3]–[6]. Такая цепочка частиц схематически представлена на рис. 1.1. Соответствующая механическая модель может быть получена из стандартного гамильтониана,

$$\mathcal{H} = K + U, \quad (1.1)$$

где K – кинетическая, а U – потенциальная энергия. Кинетическая энергия определяется стандартно:

$$K = \frac{m_a}{2} \sum_n \left(\frac{dx_n}{dt} \right)^2, \quad (1.2)$$

где m_a – масса частицы, x_n – координата n -той частицы цепи. Потенциальная энергия U цепи, представленной на рис. 1.1, состоит из двух частей,

$$U = U_{\text{sub}} + U_{\text{int}}. \quad (1.3)$$

Здесь первое слагаемое U_{sub} характеризует взаимодействие цепи с внешним периодическим потенциалом (on-site potential) и берется в простейшей форме

$$U_{\text{sub}} = \frac{\varepsilon_s}{2} \sum_n \left[1 - \cos \left(\frac{2\pi x_n}{a_s} \right) \right], \quad (1.4)$$

где ε_s – амплитуда, а a_s – период потенциала. Второе слагаемое U_{int} в уравнении (1.3) задает гармоническое (линейное) взаимодействие между ближайшими соседними звеньями цепи

$$U_{\text{int}} = \frac{g}{2} \sum_n (x_{n+1} - x_n - a_0)^2, \quad (1.5)$$

которое характеризуется коэффициентом жесткости g и равновесным расстоянием межатомного потенциала a_0 в отсутствии внешнего потенциала (см. рис. 1.1). Выбор модели, задаваемой функцией Гамильтона (1.1) – (1.5), может быть оправдан при выполнении следующих упрощений соответствующей физической системы:

- (i) Частицы цепи могут двигаться только в одном измерении;
- (ii) В общем выражении для внешнего потенциала подложки энергия записывается как

$$U_{\text{sub}} = \sum_n V_{\text{sub}}(x_n), \quad (1.6)$$

где периодическая функция $V_{\text{sub}}(x)$ раскладывается в ряд Фурье и учитывается только его первый член;

(iii) Энергия межчастичного взаимодействия состоит только из парного взаимодействия ближайших соседних частиц

$$U_{\text{int}} = \sum_n V_{\text{int}}(x_{n+1} - x_n), \quad (1.7)$$

где потенциал взаимодействия $V_{\text{int}}(x)$ раскладывается в ряд Тейлора и учитывается только гармоническое взаимодействие, так что $g = V''_{\text{int}}(a_0)$.

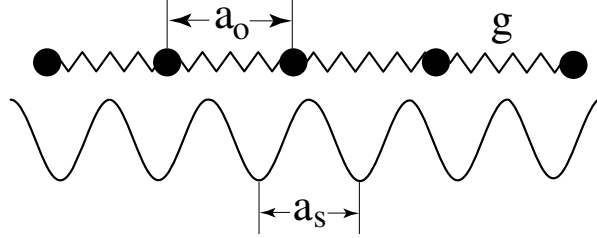


Рис. 1.1. Схематическое представление модели Френкеля-Конторовой: цепочка частиц, связанных гармоническими пружинами с коэффициентом жесткости g , взаимодействующая с внешним периодическим потенциалом периода a_s .

Введя безразмерные переменные, мы можем переписать гамильтониан (1.1)–(1.5) в более удобной форме ($H = 2\mathcal{H}/\varepsilon_s$)

$$H = \sum_n \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{dx_n}{dt} \right)^2 + (1 - \cos x_n) + \frac{g}{2} (x_{n+1} - x_n - a_0)^2 \right\}, \quad (1.8)$$

где $a_0 \rightarrow (2\pi/a_s)a_0$, $x_n \rightarrow (2\pi/a_s)x_n$, $t \rightarrow (2\pi/a_s)(\varepsilon_s/2m_a)^{1/2}t$, а безразмерная константа жесткости изменяется согласно правилу $g \rightarrow (a_s/2\pi)^2 g(\varepsilon_s/2)^{-1}$. В этой перенормированной форме гамильтониан (1.8) описывает гармоническую цепочку частиц единичной массы, находящихся под действием внешнего синусоидального потенциала с периодом $a_s = 2\pi$ и амплитудой $\varepsilon_s = 2$. Для того чтобы получить все физические (размерные) значения из соответствующих безразмерных, нужно пространственные переменные умножить на $(a_s/2\pi)$, частоты – на $(2\pi/a_s)\sqrt{\varepsilon_s/2m_a}$, массы – на m_a , а энергии – на $(\varepsilon_s/2)$.

Из гамильтониана (1.8) мы можем получить соответствующее уравнение движения дискретной цепи

$$\frac{d^2 x_n}{dt^2} + \sin x_n - g(x_{n+1} + x_{n-1} - 2x_n) = 0. \quad (1.9)$$

Здесь важно заметить, что уравнение (1.9) не содержит явно равновесного шага цепи a_0 .

В этой главе, также как и в двух следующих главах 3 и 4, посвященных динамике кинков и бризеров, мы будем рассматривать только бесконечные цепочки с $a_0 = a_s$, когда основное состояние цепи (т. е. стационарное состояние, соответствующее абсолютному минимуму потенциальной энергии) описывается *соизмеримым расположением частиц*. Это означает, что каждый минимум потенциала подложки занят одной частицей, так что “покрытие” θ (определяемое как отношение числа частиц к числу минимумов потенциала подложки) равно единице: $\theta = 1$. В этом случае удобно вести новые переменные для смещений частиц u_n , определяемые соотношениями $x_n = na_s + u_n$. Когда смещения u_n малы, $|u_n| \ll a_s$, мы можем линеаризовать уравнение движения и получить

$$\frac{d^2 u_n}{dt^2} + u_n - g(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) = 0. \quad (1.10)$$

Уравнение (1.10) описывает линейные моды цепи, которые также называют *фононами*, $u_n(t) \propto \exp[i\omega_{\text{ph}}(\kappa)t - i\kappa n]$. Они характеризуются *дисперсионным соотношением*

$$\omega_{\text{ph}}^2(\kappa) = \omega_{\text{min}}^2 + 2g(1 - \cos \kappa), \quad (1.11)$$

где κ – безразмерное волновое число ($|\kappa| \leq \pi$). Согласно дисперсионному соотношению (1.11), частотный спектр цепи ФК соответствует конечной зоне, отделенной от нуля щелью $\omega_{\text{min}} \equiv \omega_{\text{ph}}(0) = 1$, и ограниченной частотой обрезания $\omega_{\text{max}} \equiv \omega_{\text{ph}}(\pi) = \sqrt{\omega_{\text{min}}^2 + 4g}$.

Если смещения частиц не являются малыми, то линейное приближение перестает работать, а исходное нелинейное уравнение движения (1.9) может одновременно допускать как протяженные (нелокализованные) моды (которые являются обобщениями линейных мод – фононов) так и новый тип возбуждений цепи – локализованные моды. Наиболее просто ввести и описать эти нелинейные моды можно при использовании

континуального приближения для динамики дискретной цепи. Корректная процедура получения уравнений движения в континуальном пределе из дискретной модели предложена Розенау [7]. Этот подход может быть применен к динамике цепей с произвольными потенциалами подложки и межчастичного взаимодействия.

Для получения континуальной модели перепишем уравнение движения, которое соответствует гамильтониану (1.1)–(1.5), в общей форме

$$\frac{d^2 u_n}{dt^2} = F_{\text{int}}(a_s + u_n - u_{n-1}) - F_{\text{int}}(a_s + u_{n+1} - u_n) + F_{\text{sub}}(u_n), \quad (1.12)$$

где

$$F_{\text{int}}(u) = -\frac{dV_{\text{int}}(u)}{du}, \quad F_{\text{sub}}(u) = -\frac{dV_{\text{sub}}(u)}{du}.$$

Уравнение (1.12) можно модифицировать дальше, введя так-называемые относительные длины связей, определяемые как $v_n = (u_n - u_{n-1})/a_s$. В результате мы получим уравнение

$$a_s \frac{d^2 v_n}{dt^2} = -[F_{\text{int}}(a_s + a_s v_{n+1}) + F_{\text{int}}(a_s + a_s v_{n-1}) - 2F_{\text{int}}(a_s + a_s v_n)] + [F_{\text{sub}}(u_n) - F_{\text{int}}(u_{n-1})]. \quad (1.13)$$

Теперь мы рассмотрим дискретные величины v_n как функции континуальной переменной na_s и разложим в степенной ряд функцию v_{n+1} в окрестности v_n . Формально это можно сделать, введя новую переменную x и континуальную функцию $v(x)$, заменяя $n \rightarrow x = na_s$ и $v_n \rightarrow \partial u / \partial x|_{x=na_s}$. Оставляя в разложении только члены наименьших порядков, мы получим [7]

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + a_s \hat{L}_A \frac{\partial}{\partial x} \left\{ F_{\text{int}} \left[a_s \left(1 + \frac{\partial u}{\partial x} \right) \right] \right\} - F_{\text{sub}}(u) = 0, \quad (1.14)$$

где

$$\hat{L}_A = 1 + \frac{a_s^2}{12} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \dots$$

Тогда, действуя оператором $\hat{L}_A^{-1}$ на уравнение (1.14), мы получим континуальное уравнение с точностью до порядка $\mathcal{O}(a_s^4)$,

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \frac{a_s^2}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial^2 x \partial^2 t} - F_{\text{sub}}(u) + a_s \frac{\partial}{\partial x} \left\{ F_{\text{int}} \left[a_s \left(1 + \frac{\partial u}{\partial x} \right) \right] - \frac{a_s}{12} \frac{\partial}{\partial x} F_{\text{sub}}(u) \right\} = 0.$$

Описанный выше метод учитывает все члены малых порядков, которые обусловлены эффектом дискретности цепи. В частности, применив его к рассмотренной выше модели ФК, мы получим возмущенное уравнение синус-Гордон

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - d^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \sin u = \epsilon f(u), \quad (1.15)$$

где $d = a_s \sqrt{g}$, а функция

$$\epsilon f(u) = \frac{a_s^2}{12} \left[\frac{\partial^4 u}{\partial^2 x \partial^2 t} + \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 \sin u - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \cos u \right] \quad (1.16)$$

учитывает в первом приближении эффекты, обусловленные дискретностью цепи.

1.2 Уравнение синус-Гордон

Если в стандартной модели ФК пренебречь эффектами дискретности, то мы получим хорошо известное уравнение синус-Гордон (СГ)

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - d^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \sin u = 0, \quad (1.17)$$

где $d = a_s \sqrt{g}$, а $g = V_{\text{int}}''(a_s)$. Изменив пространственную переменную $x \rightarrow x/d$, мы преобразуем уравнение (1.17) в каноническую форму

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \sin u = 0. \quad (1.18)$$

Самым замечательным свойством нелинейного уравнения в частных производных (1.18) является его полная интегрируемость. Действительно, уравнение СГ было одним из первых обнаруженных уравнений с *многосолитонным поведением*.

В этой трансформированной форме уравнение (1.18) первоначально было рассмотрено Энепером [8] в дифференциальной геометрии поверхностей с постоянной отрицательной кривизной Гаусса. Исследование уравнения (1.18) в контексте дифференциальной геометрии выявило очень интересные свойства, включая возможность получить из одного известного решения уравнения (1.18) новое (неизвестное) решение так называемым методом преобразования Бэклунда [9].

Уравнение (1.18) нашло первое применение в физике для построения упрощенных моделей дислокаций (см. ниже главу 2), а кинки и бризеры для уравнения СГ впервые были введены Сегюром с соавторами более сорока лет назад [10]–[12] (см. также ссылки [13, 14]). Оригинальное немецкое название для кинков (kinks) и бризеров (breathers) было *translatorische* и *oszillatorische Eigenbewegungen*. С исторической точки зрения интересно отметить, что этому предшествовало более чем десятилетнее исследование солитонных свойств более известного уравнения Кортевега–де Фриза [15, 16]. Независимо, Перинг и Скирм [17] ввели СГ уравнение как простую одномерную модель скалярной теории поля, моделирующую классическую частицу. Почти одновременно, уравнение СГ появилось в теории слабой сверхпроводимости, как основное нелинейное уравнение, описывающее так называемые длинные джозефсоновские контакты [18], где кинковое решение описывает квант магнитного поля – *флаксон*. Два следующих важных шага в истории уравнения СГ сделали Скотт [19], предложивший важную с педагогической точки зрения очень простую модель цепи связанных маятников (механический аналог цепи ФК), и Абловитц с соавторами [20], получившие решение соответствующей обратной задачи рассеяния.

Позже было доказано, что уравнение СГ (1.18) является полностью интегрируемым в естественных переменных, возникающих при решении обратной задачи рассеяния. Описание этого метода интегрирования можно найти, например, в монографии [21]. Здесь мы только приведем основные свойства уравнения (1.18) и его решений, имеющих форму *нелинейных мод*, которые будут в дальнейшем нужны нам для изучения дискретной модели ФК.

Система СГ имеет три типа элементарных возбуждения: *фононы*, *кинки* и *бризеры*.

Фононы являются протяженными периодическими решениями СГ модели, описываемыми в линейном пределе обычные непрерывные монохромные волны $u(x, t) \propto \exp(i\omega t - ikx)$. Фононы характеризуются дисперсионным соотношением – зависимостью частоты волны ω от волнового числа k : $\omega_{\text{ph}}^2(k) = 1 + k^2$, которое является длинноволновым приближением выражения (1.11). Нелинейная модель обладает набором периодических решений, которые обобщают линейные волны, но их частота уже зависит от амплитуды волны.

Кинки, другое название – *топологические солитоны*, появляются в силу вырождения основного состояния системы. Одиночный кинк можно описать как решение, связывающее два ближайших тождественных минимума периодического потенциала подложки

$$u_k(x, t) = 4 \tan^{-1} \exp[-\sigma \gamma(v)(x - vt)], \quad (1.19)$$

где $\sigma = \pm 1$ обозначает так-называемый *топологический заряд* кинка. Назовем решение (1.19) *кинком* при $\sigma = +1$, и *антикинком* при $\sigma = -1$. Параметр v , скорость кинка, не может превосходить своего максимального значения c , соответствующего скорости звука. Скорость кинка определяет его ширину $d_{\text{eff}} = d/\gamma(v)$, где $d = c = a_s \sqrt{g}$, а зависимость от скорости множителя $\gamma(v) = 1/\sqrt{1 - (v/c)^2}$ можно трактовать как Лоренцевское уменьшение ширины кинка, вытекающее из релятивистской инвариантности модели СГ.

Бризеры, другое название – *динамические солитоны*, являются *пространственно локализованными* осциллирующим нелинейными модами. Для уравнения СГ бризер имеет форму

$$u_{\text{br}}(x, t) = 4 \tan^{-1} \left\{ \left(\frac{\sqrt{1 - \Omega^2}}{\Omega} \right) \frac{\sin(\Omega t)}{\cosh(x\sqrt{1 - \Omega^2})} \right\}. \quad (1.20)$$

Он описывает нелинейное колебание с внутренней частотой Ω , $0 < \Omega < \omega_{\text{min}}$ и амплитудой $u_{\text{max}} = 4 \tan^{-1}(\sqrt{1 - \Omega^2}/\Omega)$, локализованное на интервале ширины $b = d/\sqrt{1 - \Omega^2}$.

Энергию кинка в безразмерных единицах можно представить в форме $E_k(v) = mc^2 \gamma(v) \approx mc^2 + \frac{1}{2} mv^2$. Эта аппроксимация позволяет определить его массу покоя $m = 2/(\pi^2 \sqrt{g})$ и энергию покоя $\varepsilon_k = mc^2 = 8\sqrt{g}$. Для энергии бризера можно получить формулу $\varepsilon_{\text{br}} = 2\varepsilon_k \sqrt{1 - \Omega^2}$, таким образом $0 < \varepsilon_{\text{br}} < 2\varepsilon_k$. В пределе низких частот, $\Omega \ll 1$, бризер можно качественно трактовать как слабо связанную пару кинка и антикинка.

Кинки, размещенные вблизи друг друга, притягиваются либо отталкиваются, в зависимости от знака их относительного топологического заряда $\sigma_1 \sigma_2$. Энергия отталкивания двух кинков, расположенных на расстоянии R друг от друга, равна (см., например, работу [22]) $v_{\text{int}}(R) \approx \varepsilon_k \sinh^{-2}(R/2d)$, а кинк и антикинк притягиваются друг к другу с энергией, описываемой потенциалом взаимодействия $v_{\text{int}}(R) \approx -\varepsilon_k \cosh^{-2}(R/2d)$. Таким образом, энергию взаимодействия двух неподвижных кинков с топологическими зарядами σ_1 и σ_2 , находящихся друг от друга на расстоянии R ($R \gg d$), можно приблизительно представить как $v_{\text{int}}(R) \approx 32 \sigma_1 \sigma_2 \sqrt{g} \exp(-R/d)$.

В рамках уравнения СГ кинки и бризеры двигаются вдоль цепи без потерь энергии на диссипацию. Действительно, решение, соответствующее движущемуся бризеру, можно легко получить из уравнения (1.20),

применив преобразование Лоренца. Уравнение СГ полностью интегрируемо, в силу этого, все возбуждения взаимодействуют "упруго" – в результате их столкновений происходит только сдвиг фаз (более детальное описание можно найти в монографии [21]). Поэтому кинки и бризеры можно рассматривать как *собственные нелинейные моды* или квазичастицы модели СГ. Такое описание продолжает работать и для почти интегрируемых модификаций уравнения СГ, когда в модель включаются малые возмущения, подобные тем, которые появляются при получении уравнения СГ из исходной модели ФК в квази-непрерывном приближении, учитывающем эффекты слабой дискретности. Фактически, под действием малых возмущений (как не зависящих, так и зависящих от времени), кинки ведут себя подобно деформируемым квазичастицам, т. е. их форма может тоже деформироваться. Более того, присутствие слабых возмущений может приводить к появлению некоторых новых свойств, например столкновение кинка с антикинком уже может быть неупругим и приводить к образованию долгоживущей бризерной моды.

Для интегрируемой модели СГ любое локализованное возбуждение можно представить как некоторую асимптотическую суперпозицию трех типов элементарных возбуждений, т. е. кинков, бризеров и фононов. Многие нелинейные периодические решения уравнения СГ также могут быть найдены в аналитической форме. Например, цепочка кинков описывается следующим решением уравнения СГ, известным как *кноидальная волна*,

$$u(x, t) = -\sin^{-1}[\operatorname{cn}(x/k; k)], \quad (1.21)$$

где cn – эллиптическая функция Якоби. Уравнение (1.21) описывает периодическую последовательность кинков с шириной kd (где $k < 1$), отделенных друг от друга на равные расстояния $L = 4dk K(k)$ ($K(k)$ – полный эллиптический интеграл первого типа). В модели СГ взаимодействие кинка и высоко-амплитудных (ангармонических) фононов будет тоже упругим, и его можно описать точным решением уравнения СГ [23, 24]. В мало-амплитудном пределе это общее кинк-фононное взаимодействие описывается фазовым сдвигом в упругом рассеянии линейных фононов СГ кинком [25] (см. также ссылку [26]).

Как было отмечено выше, в рамках точно интегрируемой модели СГ столкновение солитонов является упругим, т. е. их форма, скорости и энергии не меняются после столкновения, эффект взаимодействия проявляется только в сдвиге фаз сталкивающихся солитонов. Например, если первый кинк покоится, а другой движется из бесконечности с начальной скоростью v_{in} , то после их взаимодействия первый кинк будет оставаться неподвижным, но его координата будет уже сдвинута на постоянную величину Δx_1 , где (см., например, монографию [21])

$$\Delta x_1 = \frac{d}{\gamma} \ln \left(\frac{\gamma + 1}{\gamma - 1} \right), \quad \gamma = \sqrt{1 - v_{\text{in}}^2/c^2}.$$

Аналогично, столкновение других нелинейных возбуждений (фононов, кинков и бризеров) в рамках модели СГ тоже сопровождается только сдвигом фаз. Одним из основных свойств столкновения солитонов в интегрируемых моделях является их *двухчастичная природа*: Когда сталкивается несколько солитонов, сдвиг любого солитона, участвующего во взаимодействии, равен сумме сдвигов, вызванных его независимым попарным взаимодействием с другими солитонами. Такая двухчастичная природа солитонных взаимодействий является специфическим свойством интегрируемых систем. Если исходная СГ система модифицирована внешними (даже консервативными) возмущениями, то уже могут появиться эффекты много- (в частности трех-) частичного взаимодействия [27].

Физические Модели

В этой главе мы обсуждаем несколько примеров физических систем, для которых модель ФК играет важную роль. Мы демонстрируем, как построить упрощенную модель, сохраняющую все основные особенности динамики данной системы, а также объясняем, почему во многих случаях стандартная модель ФК должна быть модернизирована для учета других важных свойств системы, таких как несинусоидальность формы внешнего потенциала, ангармоничность взаимодействия между соседними частицами, эффекты термализации, эффекты обусловленные неоднородностью физической системы и т.д. Однако, главной целью этой главы является не только список примеров различных физических систем, которые могут быть эффективно проанализированы при помощи модели ФК, но и предоставление важных указаний для построения низкоразмерных моделей в других приложениях.

2.1 Общий подход

Основной подход, используемый для получения модели ФК, довольно прост. Прежде всего, из исходной (обычно достаточно сложной) дискретной нелинейной системы нужно извлечь низкоразмерную подсистему и описать остающуюся часть как *подложку*, введя для учета взаимодействия с ней некоторый эффективный потенциал. Элементы этой одномерной дискретной подсистемы будут играть роль эффективных атомов в модели ФК. Во многих случаях эти элементы действительно соответствуют реальным атомам, но они также могут моделировать целые группы атомов, как в случае молекулярных цепей типа ДНК, они могут соответствовать спинам магнитной цепи, или даже описывать некоторые сложные объекты, такие как точечные джозефсоновские контакты в некоторой решетке. В модели эффективные атомы взаимодействуют со своими соседями, и самое простое взаимодействие – это линейная связь между ближайшими соседями. В системах, описываемых моделями типа ФК, эффективная подложка должна иметь кристаллическую структуру. В простейшем случае, когда структура соответствует элементарной ячейке Браве, т.е. один атом приходится на единичную ячейку, в разложении периодического потенциала в ряд Фурье можно оставить только первый член и получить синусоидальный потенциал подложки.

В рамках этого подхода стандартная модель ФК может описать, с большей или меньшей строгостью, реалистическую физическую систему, только если ее одномерная подсистема и подложка имеют различную природу, т. е. атомы в модели ФК являются легкими частицами, в то время как потенциал образован тяжелыми частицами, которые, пренебрегая их движением, можно считать "замороженными". Фактически, такая ситуация соответствует многим физическим системам. Например, так обстоит дело в физике поверхности, где модельные атомы соответствуют адсорбированным атомам, а подложка соответствует поверхности кристалла, или в цепочках водородных связей, где атомами модели будут легкие атомы водорода, в то время как потенциал подложки образуют тяжелые атомы кислорода. Однако даже в таких случаях, как теория дислокаций, где атомы и подложка имеют одну и ту же природу, модель ФК остается очень полезным приближением, позволяющим описывать многие нетривиальные явления динамики таких систем, часто даже на простом качественном уровне.

Еще один класс важных проблем, описываемых моделью ФК, связан с *физикой несоизмеримых систем*. А именно, если мы рассмотрим цепь со свободными концами и предположим, что равновесное расстояние между взаимодействующими частицами не совпадает с периодом потенциала подложки, то мы естественно получим одну из самых простых физических моделей с двумя (или более) конкурирующими шкалами длины. В этом случае, содержание модели ФК резко увеличивается из-за возможности существования двух качественно разных типов основного состояния системы – *соизмеримого* и *несоизмеримого*. Таким образом, модель ФК также появляется во многих приложениях, связанных с физикой несоизмеримых систем.

Ниже мы приведем несколько примеров физических моделей, для которых модель ФК и/или её обобщения играют важную роль. Эти модели имеют три разных уровня. Модели *первого уровня*, такие как простая механическая цепочка маятников, прямо сводятся к модели ФК. Модели *второго уровня*, например описывающие

локализованные деформации решеток, используют модель ФК с более сложным типом межузельного взаимодействия и с более сложным потенциалом подложки. Наконец, модели *третьего уровня*, описывающие например динамику макромолекулы ДНК, обычно более сложны, и могут быть сведены к модели типа ФК только при условии выполнения некоторых дополнительных предположений.

2.2 Механическая модель

Одну из самых простых *макроскопических моделей*, описывающих динамику модели ФК, впервые предложил Скотт [19]. Это – экспериментальная механическая линия трансмиссий, являющаяся эффективным педагогическим пособием для наблюдения кинков и изучения их замечательных свойств. Затем Скотт [19] показал, что такая механическая система может быть легко сконструирована, как линия винтов длины L , вкрученных в медные цилиндры, которые соединены стальными пружинами и поддерживаются в горизонтальном положении рояльной струной. Меняя жесткость пружин, мы можем получить цепочку, описываемую либо квази-континуальной, либо строго дискретной моделью ФК. Полезную портативную версию данной механической линии трансмиссий можно сконструировать более простым способом, используя резиновую ленту и шпильки портних [29].

Данная система является цепочкой маятников, в которой каждый маятник соединен со своими соседями упругими пружинами, как показано на рис. 2.1. Основной переменной, характеризующей состояние маятника с номером n , является его угол вращения θ_n . Уравнение движения для вращательных степеней свободы можно записать в форме

$$I \frac{d^2 \theta_n}{dt^2} = \beta (\theta_{n+1} + \theta_{n-1} - 2\theta_n) - mgL \sin \theta_n, \quad (2.1)$$

где $I = mL^2$ – момент инерции одного изолированного маятника с массой m и длиной L , β – крутильная жесткость пружины, соединяющей два соседних маятника и g – постоянная силы тяжести. В уравнении (2.1) первый член описывает эффекты инерции маятников, второй член представляет возвратный крутящий момент между взаимодействующими маятниками, а последний член – крутящий момент силы тяжести.

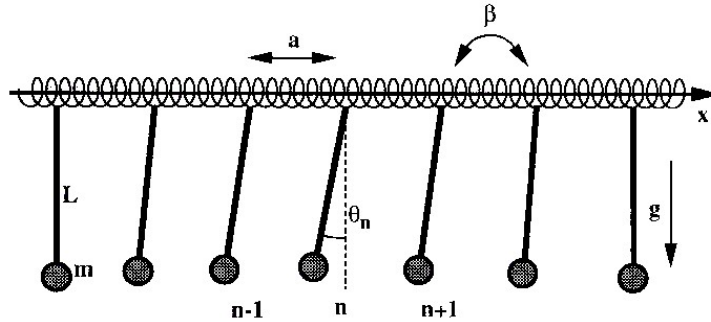


Рис. 2.1. Эскиз механической цепи, состоящей из упруго соединенных маятников. Цепочка находится под действием силы тяжести, которая создает периодический по углу вращения θ_n внешний потенциал [29].

Введя частоту маятника $\omega_0^2 = mgL/I$ и скорость звука в цепи $c_0^2 = \beta a^2/I$, мы можем привести уравнения движения к одной из форм, рассмотренных ранее в главе 1. В пределе $\beta \gg mgl$ или $c_0^2/a^2 \gg \omega_0^2$ уравнения движений (2.1) сводятся к уравнению СГ. Последнее условие можно переписать в виде $d = c_0/\omega_0 \gg a$, так что параметр d характеризует дискретность решетки и определяет также ширину кинка.

Если правый конец механической цепи совершает только малые отклонения от основного состояния $\theta = 0$, то в цепи возникают лишь мало-амплитудные волны. Если начальное возмущение является полным оборотом первого маятника, то этот поворот будет коллективно распространяться по цепи в форме кинка. В экспериментальной цепи, показанной на рис. 2.1, можно создать кинк, перемещающийся справа налево. После отражения от противоположного свободного конца он начнет двигаться слева на право в форме антикинка.

Так как ширина кинка определяется параметром дискретности d , то случай $d \gg a$ соответствует континуальной модели, описываемой уравнением СГ. Однако, если $d \sim a$, то эффекты дискретности становятся важными и могут сильно влиять на движение кинка. В случае $d \ll a$ ширина кинка становится сравнимой с шагом цепи, и вследствие этого кинк сильно закрепляется эффективным потенциалом решетки, как показано на рис. 2.2. В такой сильно дискретной цепи, уже можно наблюдать последовательность кинков и антикинков, так как все они будут закреплены на решетке.

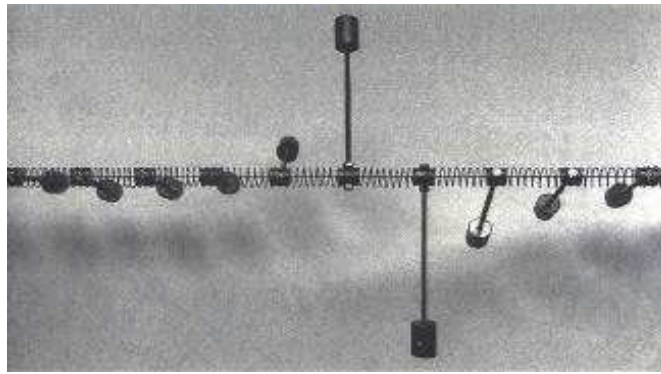


Рис. 2.2. Узкий кинк в сильно дискретной цепи маятников с очень слабым их взаимодействием. Фотография R. Chauх [29].

Механическая цепочка маятников может быть обобщена далее на случай, когда потенциал подложки имеет только два положения равновесия. Такая механическая аналоговая модель была построена в 1998 Dusuel *et al.* [30], для моделирования компактных кинков – кинкоподобных мод, характеризующихся отсутствием длинных хвостов и локализованных в компактной области.

2.3 Динамика дислокаций

Одним из первых приложений модели ФК была теория дислокаций в металлах [3]–[5], [11, 12], [31]–[33]. Значение этой теории трудно переоценить, поскольку именно дислокации ответственны за большинство механических свойств твердых тел. Модель ФК была первой моделью, которая описала динамику дислокационного ядра на атомном уровне и позволила получить простые формулы, пригодные для расчетов. Следует отметить, что крупномасштабное моделирование динамики дислокаций из первых принципов является отнюдь не простой проблемой даже для современных суперкомпьютеров.

В теории дислокаций модель ФК имеет простой физический смысл. Действительно, рассмотрим дополнительную атомную полуплоскость, вставленную в идеальную кристаллическую решетку как показано на рис. 2.3. После релаксации к равновесному состоянию решетка будет содержать одну *краевую дислокацию*. Атомный слой, перпендикулярный к вставленной плоскости, разделяет кристалл на две различные части. Атомы, находящиеся в этом пограничном слое (плоскости скольжения), находятся во внешнем периодическом потенциале, созданном окружающими их атомами решетки; это означает, что мы можем использовать модель ФК. Заметим, что сходные модели появляются при описании динамики двумерных дефектов, таких как *границы двойникования* и *доменные стенки* в сегнетоэлектриках и ферро- или антиферромагнетиках, которые будут рассмотрены ниже.

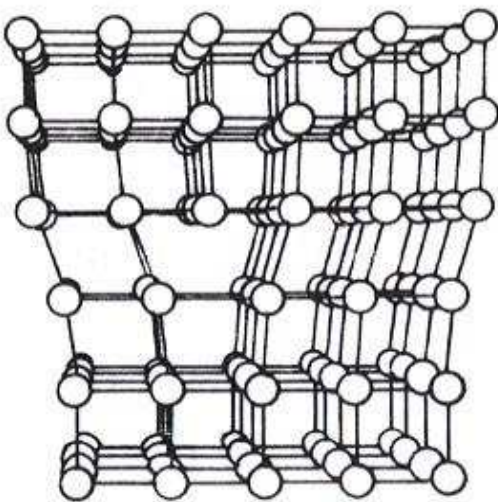


Рис. 2.3. Схематическое изображение 3-мерной атомной конфигурации, соответствующей атомной плоскости, вставленной в идеальную кристаллическую решетку.

Двумерную плоскость скольжения можно рассматривать в рамках одномерной модели ФК как атомную цепочку, перпендикулярную к линии краевой дислокации. В этой модели дислокационное ядро моделируется

кинком ФК, а дискретность модели объясняет существование энергетического барьера, известного как барьер Пейерлса–Набарро (ПН), для перемещения дислокаций.

Следующий уровень моделирования — рассмотрение самой дислокационной линии как цепи ФК (разумеется, другой), находящейся во внешнем периодическом потенциале. Этот потенциал представляет собой первичный рельеф ПН. Движение такой *дислокационной линии* происходит за счет создания пар кинков и антикинков. При этом участок дислокации сдвигается в соседнюю долину внешнего потенциала ПН. Кинки движутся во *вторичном* рельефе ПН, пока не достигнут конца дислокации или аннигилируют с другим кинком, обладающим противоположным топологическим зарядом. Заметим, что дислокация сама является топологическим объектом, поэтому она не может быть разорвана. Ее концы могут располагаться на поверхности кристалла или на других дефектах.

Однако следует иметь в виду, что модель ФК сталкивается с серьезными трудностями при описании динамики дислокаций. В одномерной модели с близкодействующим взаимодействием между частицами, каковой является стандартная модель ФК, взаимодействие между точечными дефектами (кинками) на большом расстоянии всегда экспоненциальное (то есть близкодействующее). Но хорошо известно, что взаимодействие между точечными дефектами в кристаллах всегда дальнедействующее. Из теории упругости следует, что энергия взаимодействия спадает по степенному закону $\propto R^{-3}$ при больших расстояниях R между точечными дефектами. Этот закон взаимодействия является следствием смещений атомов *подложки* из равновесных положений. Одномерные модели типа ФК не учитывают этот эффект. Однако высоту барьера ПН, которая является локальной характеристикой системы, можно правильно предсказать с помощью модели ФК. В рамках дислокационной теории дислокации рассматриваются как неразрывные линии, взаимодействующие по законам теории упругости (так что это взаимодействие описывается правильно). Эти линии искусственно помещены в рельеф ПН, рассчитанный согласно эффективной модели ФК. Альтернативный подход состоит в использовании модели ФК со степенным межатомным взаимодействием, моделирующим реальное упругое взаимодействие (такой подход будет рассмотрен ниже в главе 3). Оба эти подхода можно объединить, если моделировать дислокацию, окруженную эффективной трубкой [34, 35]. Внутри трубки используется модель ФК, тогда как вне ее действует континуальная теория упругости.

2.4 Поверхности и слои адсорбированных атомов

Одно из самых важных приложений модели ФК найдено в физике поверхности, где эта модель используется для описания динамики атомов адсорбированных на поверхности кристалла. Здесь потенциал подложки ФК создают атомы поверхности кристалла, а адсорбированные на этой поверхности атомы описываются как эффективные частицы модели ФК. Адсорбированные атомы, или *адатомы*, обычно более мобильны, чем атомы подложки, которые могут только колебаться около своих положений равновесий. Поэтому, для этих моделей потенциал подложки можно считать жестким. В некоторых случаях, например, для абсорбции на плоскости (112) кристалла ОЦК, поверхностные атомы создают бороздчатый потенциал. В этом случае адатомы, расположенные в бороздах поверхности, можно рассматривать как одномерную цепочку. Другим примером является поверхности полупроводников, где адатомы адсорбируются близко к вицинальным ступенькам и поэтому они организуются в структуру слабо взаимодействующих цепей. В последнем случае, расстояние между цепями может сильно зависеть от угла выбранной вицинальной поверхности

В приложениях модели ФК к физике поверхности параметр концентрации атомов θ может изменяться в широком диапазоне, от значения $\theta = 0$ (единичный адатом) до $\theta = 1$ (моно слой) и даже может принимать большие значения, когда эффективный размер адатомов меньше периода внешнего потенциала (например, для атомов лития, адсорбированных на поверхностях переходных металлов). В силу этого модель ФК позволяет анализировать многие интересные физические явления, включая переходы между различными соразмерными структурами и переходы между соизмеримыми и несоизмеримыми структурами. Параметры модели ФК могут быть оценены (или даже вычислены из первых принципов) с хорошей точностью [36]. В слое адсорбированных атомов безразмерная константа упругости g модели ФК обычно имеет значения порядка $0.1 \div 1$. Более того, адсорбированные системы могут быть изучены экспериментально прямыми методами, такими как сканирующая туннельная микроскопия, которые обеспечивают прямую проверку многих теоретических предсказаний.

Когда материал выращен на подложке несоразмерной решетке, возникающие области напряжений могут привести к появлению самоорганизованных структур со шкалой длин, во много раз превышающей межатомные расстояния. Один хорошо известный пример — Ge/Si(001) димеризируется в сверхслойную систему. Пленка германия находится под напряжением сжатия (4% относительно объема) и система понижает ее энергию, создавая димерные вакансии на поверхностном слое; эти вакансии начинают заполнять нависающие над ними атомы второго слоя, для того чтобы образовать недостающие им ненасыщенные связи. Димерные вакансии выстраиваются в *вакансионные линии* с $2 \times N$ периодичностью, где оптимальное значение N зависит от доли германия [37].

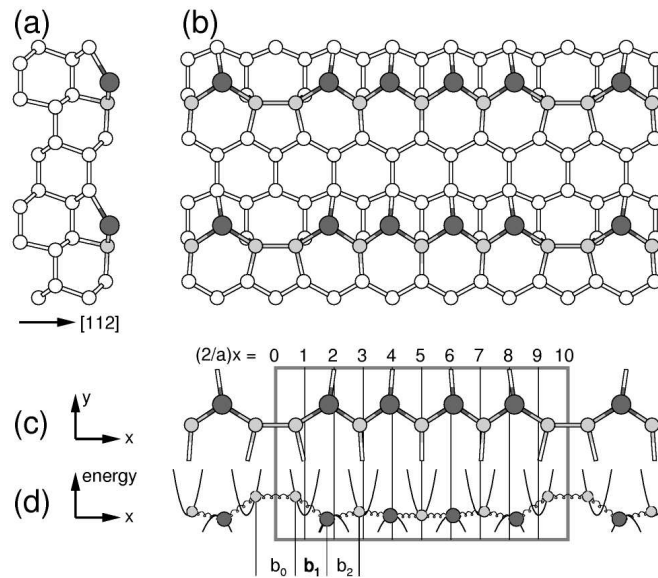


Рис. 2.4. Виды со сбоку (a) и сверху (b) на систему Ga/Si(112) с периодом рядов вакансий $N = 5$. Полностью отрелаксированные координаты получены из первых принципов при минимизации общей энергии. Цепочка связанных атомов Ga (черные) и Si (светлые) (c). Одномерная ФК модель, соответствующая этой Ga-Si цепи (d). Смещения атомов (горизонтальные) определены относительно идеальных положений (они показаны тонкими линиями сетки координат) атомов подложки; вертикальные смещения обусловлены только индивидуальной энергией напряжений подложки [38].

Несколькими исследователями было показано, что анализ взаимодействия вакансионных линий, вызванного возникающими напряжениями в псевдоморфической адсорбционной системе, может быть проведен в рамках модели ФК. Например, это было сделано для системы Ga/Si(112) путем нахождения всех микроскопических параметров из вычисления общей энергии [38]. Несмотря на то, что ФК модель учитывает только гармоническое взаимодействие соседних частиц, она с хорошей точностью воспроизводит результаты, найденные из первых принципов и, таким образом, позволяет провести достаточно простой анализ основных взаимодействий.

Микроскопическая структура вакансионных линий в Ga/Si(112) показана на рис. 2.4. Так как Ga трехвалентен, то он предпочитает адсорбироваться на местах поверхности, где он может образовать три связи. Объемно-насыщенная подложка Si(112), которая может быть представлена как последовательность (111)-подобных террас удвоенной ширины и одинарных (111)-подобных ступеней, обеспечивает такие места для образования трех связей только на ребрах ступеней – см. рис. 2.4(b). Единичная вакансия галлия оставляет открытыми на грани ступени два атома кремния, которые связываются, образуя димер. Как показано на рис. 2.4, Ga-Si цепочка (с вакансионным периодом N) может быть отображена на одномерную цепочку гармонических пружин, соединяющих N атомов Si и $N - 1$ атомов Ga в элементарную ячейку длины Na – см. часть (d) рис. 2.4. Эта модель впервые была предложена Юнгом и др. [39] и позже обоснована Баски и др. [40] и Эрвином и др. [38] из первых принципов при помощи вычисления общей энергии.

Кроме того, модель ФК и ее обобщения могут быть использованы для описания динамики чистых поверхностей, трактуя атомы поверхности как атомы эффективной системы ФК, в то время как атомы нижележащего слоя создают эффективный потенциал подложки. В частности, модель ФК может быть использована для описания *поверхностной реконструкции* [41, 42], структуры *вицинальных поверхностей полупроводников* [43], процессов *роста кристалла* [44] и скольжения миграционных островков по поверхности кристалла [45].

Одномерность стандартной модели ФК является ее серьезным ограничением. Действительно, обычно квазиодномерные цепи адатомов не являются полностью независимыми друг от друга, они могут формировать систему параллельных слабо взаимодействующих цепей. Например, атомы, адсорбированные на ступенчатых или рифленых поверхностях кристалла, могут быть описаны как анизотропная двумерная система слабо связанных цепей. Рассмотрение кинков первичных цепей ФК как квазичастиц на периодическом потенциале ПН позволяет описать коллективные возбуждения двумерной системы как *вторичные кинки*, которые сами по себе могут быть описаны в рамках *вторичной модели ФК*. Система взаимодействующих цепей ФК была изучена (см., например, работы Брауна и др. [46] и Брауна и Кившара [47]) и есть много работ посвященных статистической физике адсорбированных слоев (см., например, монографию Люксютова и др. [48] и приводимые в ней ссылки).

Более общие модели, описывающие динамику в двумерных системах, уже соответствуют векторному обобщению модели ФК. Эти модели более реалистичны при описании двумерных слоев атомов, адсорбированных на поверхности кристалла. В них каждый атом имеет две степени свободы и находится под действием внешнего

двухмерного потенциала, который создают атомы поверхности кристалла. Разнообразие таких моделей обусловлена свойствами симметрии различных потенциалов подложки (изотропные модели с квадратными, треугольными, гексагональными решетками или анизотропные с, например, прямоугольной решеткой, и т.д.). Несколько примеров таких моделей будут рассмотрены в этой книге. Модель ФК можно сделать более реалистичной для широкого класса физических приложений, введя добавочную степень свободы, позволяющую атомам двигаться в перпендикулярном цепи направлении. Соответствующая модель ФК с поперечной степенью свободы была предложена Брауном и Кившарем [49]. В таких моделях возможны интересные физические эффекты, обусловленные существованием нетривиальных зигзагообразных основных состояний и, соответственно, новых типов топологических кинкоподобных возбуждений.

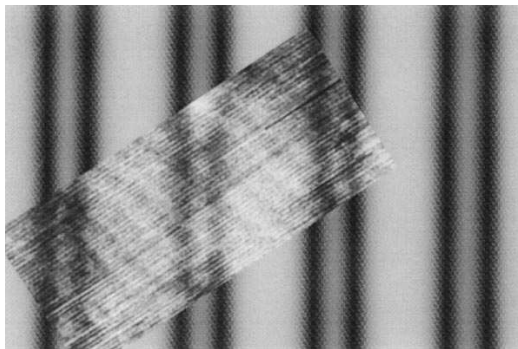


Рис. 2.5. Экспериментальные и теоретические дислокационные конфигурации для монослоя Ag на Pt(111). Вставка дает микроснимок, полученный методом сканирующего туннелирования, окружающая область показывает результат моделирования основанного на двумерной ФК модели. Темные вертикальные линии – частично не совпадающие дислокации, светлые вертикальные линии – узкие гексагональные плотноупакованные (Г.П.У.) области, светлые вертикальные области – широкие гранецентрированные кубические (Г.Ц.К.) области [50].

Многие плотно упакованные краевые слои металлических систем демонстрируют системы частичных дислокаций, которые образуются с целью уменьшения рассогласования между решеткой краевого слоя металла и решеткой подложки. Действительно, хорошо известная "елочная" реконструкция поверхности (111) чистого золота является поразительным примером такой дислокационной структуры, которая образуется из-за того, что менее координированные атомы поверхности золота имеют более короткое равновесное расстояние, чем нормально координированные внутренние атомы [41, 51]. Точно также двойные Си слои на Ru(0001) образуют полосатые дислокационные структуры [52]. Эти структуры состоят из чередующихся доменов с ГЦК и ГПУ плотными упаковками, разделенных неполными дислокациями.

Пример верхнего слоя показан на рис. 2.5, где представлена полученная методом сканирующего туннелирования, микрофотография структуры монослоя Ag на Pt(111). Вставка соответствует экспериментальной микрофотографии, а ее окружение – результатам теоретических вычислений. Для Ag на Pt(111) ГЦК области более чем в три раза шире ГПУ областей. Разницу в ширине областей можно корректно приписать тому факту, что ГЦК ячейки энергетически предпочтительнее ГПУ ячеек. Однако, излишней энергии этой монослойной структуры не достаточно для объяснения необычной ширины области ГЦК для Ag на Pt(111). Гамильтон и др. [50] показали, что отличие ширины областей является, в основном, прямым следствием близости состояния этой системы к фазовому переходу соизмеримость-несоизмеримость. Более того, эти авторы нашли, что двухмерная модель ФК может воспроизвести все основные типы дислокационных структур. Предсказания модели ФК согласуются с наблюдением того факта, что дислокации не образуются в островах до тех пор, пока их размеры не станут много больше дислокационного шага в непрерывных пленках.

2.5 Несоизмеримые фазы в диэлектриках

В некоторых системах, несоизмеримая (НС) фаза может появиться как промежуточная между двумя соразмерными кристаллическими фазами, и поэтому она должна играть важную роль в теории фазовых переходов [53]. Более того, в некоторых случаях исследование НС фазы можно свести к анализу модели типа ФК. Для определенности, мы рассмотрим модель, которая описывает последовательность твердых молекул, соединенных между собой упругими стержнями с постоянной изгибной жесткостью g , как показано на рис. 2.6 (см. работы [54, 55]). Упругие стержни стремятся сохранить линейность цепи, так как они создают момент, стремящийся уменьшить абсолютное значение угла вращения. Далее подвергнем цепочку продольной силе сжатия $P > 0$, которая

стремится нарушить горизонтальную упорядоченность молекул. В результате противодействия этих двух сил возникает поперечная модуляционная неустойчивость. Эффекты, связанные с трехмерностью кристалла, можно учесть в рамках линейной молекулярной цепи при помощи дополнительных эффективных связей, показанных на рис. 2.6 вертикальными пружинами.

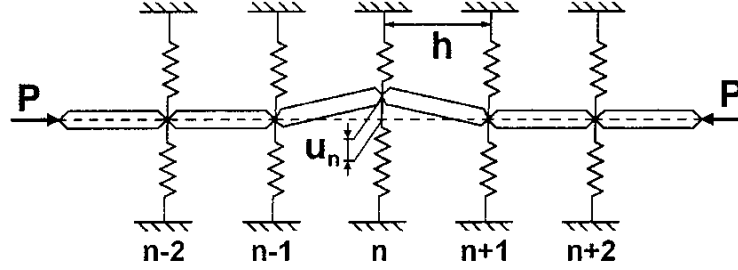


Рис. 2.6. Схематическое представление модели ЭНМ. Твердые молекулы соединены упругими стержнями, и вдоль цепи все они сжаты силой P . Каждый стержень имеет только одну степень свободы – поперечное смещение v_n [55].

Предположим, что поперечные смещения стержней v_n малы, $v_n \ll 1$. Тогда гамильтониан модели можно записать в форме

$$H = \frac{1}{2} \sum_n \left[\left(\frac{dv_n}{dt} \right)^2 + g(v_{n-1} - 2v_n + v_{n+1})^2 - P(v_{n+1} - v_n)^2 + v_n^2 + \frac{v_n^4}{2} \right],$$

которая соответствует так называемой модели упруго-шарнирно-сочлененной молекулы [Elastically Hinged Molecule (ЭНМ)]. Используя тождество $\sum_n v_n v_{n+j} = \sum_n v_{n+l} v_{n+j+l}$, гамильтониан легко переписать в форме, соответствующей цепи точечных частиц с гармоническим взаимодействием первых и вторых соседних частиц с жесткостью взаимодействия $C_1 = 4g - P$ и $C_2 = -Pg$ [56]–[59] и с потенциалом подложки, являющимся многочленом четвертого порядка. Введя новые координаты $x_n = v_{n+1} - v_n$ и $y_n = v_{n+1} + v_n$, можно показать, что статические свойства модели ЭНМ идентичны свойствам модели Янсена [60]. Заметим, что в отсутствии потенциала подложки НС фаза может возникать только если учесть взаимодействие третьих соседей.

Для того чтобы продемонстрировать, как модель ЭНМ и другие подобные модели могут быть сведены к модели типа ФК, мы рассмотрим изменение структуры модели ЭНМ при медленном уменьшении жесткости g и фиксированном значении внешнего давления P . При большом значении жесткости g система имеет только одно решение – тривиальное состояние $v_n = 0$. Критическим значением жесткости g , зависящим от значения P , будет то, при котором дисперсионная кривая обращается в нуль при $q = 2\pi\kappa$ [55]. В результате этого фазового перехода второго рода в кристалле появляется синусоидальная модуляция с волновым числом κ . Если число κ иррациональное, то период модуляционной фазы будет бесконечно длинным и конечная структура будет описываться НС фазой. Для рационального значения волнового числа $\kappa = r/q$, где r и q – соизмеримые положительные числа, такие что $2r < q$ и κ близко к $1/4$, структура кристалла может быть описана как четырех-периодическая с неизвестной медленно изменяющейся фазой $\varphi_n(t)$,

$$v_n(t) = \pm A \cos \left[\frac{\pi}{2}(n+m) + \frac{\pi}{N} + \varphi_n(t) \right], \quad (2.2)$$

где $A^2 = 2(2P - 4g - 1)$ – амплитуда соизмеримой четырех-периодической структуры [55]. Усредняя быстро изменяющиеся члены по четырем соседним узлам и считая, что φ_n меняется медленно, $|\varphi_n - \varphi_{n-1}| \ll 1$, можно получить следующее уравнение движения

$$\frac{d^2 \varphi_n}{dt^2} - 4g(\varphi_{n-1} - 2\varphi_n + \varphi_{n+1}) + \frac{A^2}{4} \sin(4\varphi_n) = 0, \quad (2.3)$$

которое можно легко привести к канонической форме модели ФК [55].

2.6 Краудионы и дефекты решетки

Пластические деформации в металлах могут быть следствием появления локальных дефектов, известных как *краудионы* [61, 62]. В кристаллической решетке краудион соответствует конфигурации, когда в плотно

упакованный ряд атомов решетки идеального кристалла вставлен лишний атом. Некоторые недавние исследования показывают, что диффузия атомов на деформированных поверхностях может опосредственно приводить к новому комбинированному механизму транспорта атомов – образованию и движению поверхностных краудионов [63]. Образование и структура поверхностного краудиона показаны на рис. 2.7(а-с). Конфигурация седловой точки [Рис. 2.7(б)] является метастабильным (иногда стабильным) состоянием, в котором добавочный (адатом) внедрен в поверхность, а иглоподобный дефект на рис. 2.7(с) является поверхностным краудионом. В этом случае краудион растягивается примерно на десять ближайших соседних интервалов и обнаруживается только для напряженных состояний со сжатием вдоль оси, перпендикулярной к направлению иглы и для растяжения вдоль направления иглы. Однажды сформировавшись, краудион может двигаться вдоль ряда атомов только за счет относительно малых изменений их положений.

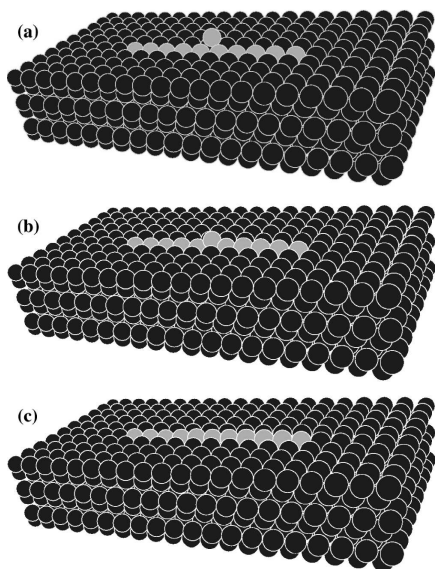


Рис. 2.7. Образование и структура поверхностного краудиона: (а) начальная конфигурация, (б) конфигурация седловой точки, (с) поверхностный краудион. Размеры краудиона распространяются вдоль направления $[110]$ (направление растяжения) примерно на 10 ближайших периодов [63].

Во многих случаях взаимодействие в кристалле организовано так, что атомы могут двигаться только вдоль некоторого выбранного направления атомов и, следовательно, вставленный атом (вместе с соседними атомами) будет формировать одномерную структуру, которая может быть описана как кинк модели ФК. Типичный размер такой структуры – примерно десять периодов кристалла, поэтому этот кинк характеризуется очень низким барьером ПН и может перемещаться вдоль ряда атомов почти свободно. В результате этого краудионы играют важную роль в пластичности металлов. Проблема краудионов была в частности изучена в работах Ландау и др. [64], Ковалева и др. [65]. Основные свойства этих моделей представлены на рис. 2.8. Целый кристалл трактуется как непрерывная трехмерная упругая среда, которую можно описать в терминах линейной теории пластичности. В этой среде вдоль направления x вырезана цилиндрическая труба радиуса b и в образовавшийся канал вставлена дискретная цепочка атомов. Параметр b имеет смысл межатомного расстояния в направлении перпендикулярном цепи, а параметр a – межатомного расстояния вдоль цепи.

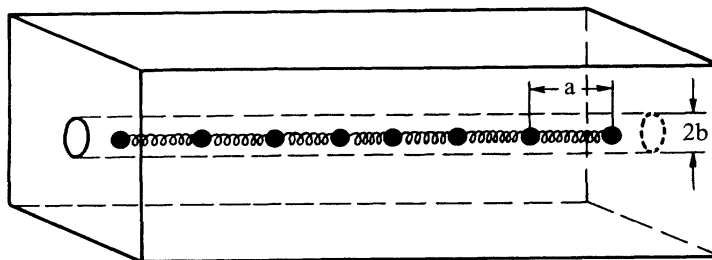


Рис. 2.8. Схематическая модель объемного краудиона в решетке. Пружинки моделируют силы взаимодействия, связывающие соседние атомы в цепи [65].

Такая модель структуры краудина использует простой скалярный вариант теории упругости, в котором рассматриваются только смещения вдоль направления цепи атомов. Как было показано Ковалевым и др. [65], эта система может быть описана обобщенной моделью ФК, включающей упругие свойства кристалла. В непрерывном приближении эта модель может быть сведена к некоторому интегрально-дифференциальному уравнению синус-Гордон, в котором учитывается эффективное дальнедействующее взаимодействие между атомами цепи.

2.7 Магнитные цепи

Подход, подобный используемому в теории дислокаций и физике поверхности, применяется также при описании динамики плоских дефектов, таких как границы двойникования [66, 67], доменные стенки в ферроэлектриках [68] - [71] и в ферромагнитных (ФМ) или антиферромагнитных цепях (АФМ) [72] - [75].

В магнитных системах *доменная стенка* — пространственно локализованная область между двумя областями с различной намагниченностью — описывается некоторым решением типа кинка, связывающего два эквивалентных основных состояния. Простейшая одномерная классическая модель магнитной цепи описывается следующим гамильтонианом [76]

$$\mathcal{H} = -J \sum_n \mathbf{S}_n \mathbf{S}_{n+1} - D \sum_n (S_n^x)^2. \quad (2.4)$$

Первый член в уравнении (2.4) описывает изотропную энергию обмена, а второй — одно-ионную анизотропию. Если J и D положительны, то ось x задает предпочтительное направление в пространстве спинов. Для минимума энергии все спины должны иметь максимальные x -компоненты. Это приводит к вырождению основного состояния и появлению двух эквивалентных состояний, разделенных статической доменной стенкой (см. рис. 2.9). Ее форма является следствием компромисса между эффектами конкуренции обменного взаимодействия J и анизотропии D . В классическом приближении спины описываются как векторы длины S , каждый из которых в сферических координатах имеет вид

$$\mathbf{S}_n = S \cdot (\sin \theta_n \cos \phi_n, \sin \theta_n \sin \phi_n, \cos \theta_n). \quad (2.5)$$

В случае сильной плоской анизотропии и поперечного магнитного поля уравнение движения для углов ϕ_n сводится к уравнению СГ [73].

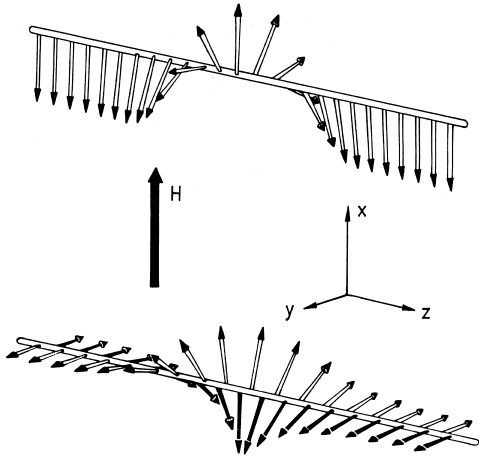


Рис. 2.9. Вверху: схематическая структура ФМ доменной стенки в присутствии магнитного поля H как 2π -перекручивание упорядоченной цепи спинов, описываемое кинком ФК модели. Внизу: АФМ доменная стенка как π -перекручивание обеих подрешеток спинов цепи.

В ФМ цепи с так называемой легко-плоскостной анизотропией в направлении поперечного магнитного поля H при достаточно низких температурах существует только одно основное состояние со всеми спинами, направленными вдоль магнитного поля. Кинковое решение в этом случае описывается 2π -перекручиванием упорядоченной цепи спинов, которое может свободно двигаться вдоль цепи без рассеяния (см. верхнюю часть рис. 2.9). В АФМ цепи основное состояние соответствует конфигурации с чередующимися спинами, т. е. состоит из двух подрешеток, которые, за исключением небольшого наклона, антипараллельны друг другу и перпендикулярны к магнитному полю H . Следовательно, здесь существует два вырожденных, но топологически неэквивалентных основных состояния, которые отличаются знаком ориентации спинов. АФМ решение в этом

случае описывается π -перекручиванием обеих подрешеток при перемещении вдоль цепи (нижняя часть рис. 2.9). Отличие в топологии приводит к различному пространственному и временному поведению компонентов спинов и сильно отображается в экспериментальных данных. В то время как в ФМ случае флуктуации спинов происходят только от 2π -солитонов, в АФМ случае они происходят за счет перебрасывания всех спинов между двумя соседствующими π -солитонами (так называемая “мода проскальзывания”). В обоих случаях флуктуации спинов в направлении цепи в значительной степени подавлены сильной плоскостной анизотропией.

Доменная стенка в магнитной системе описывается решением типа кинка и представляет микроскопическую структуру, которую сложно непосредственно наблюдать, но можно оценить её влияние на макроскопические свойства системы. Магнитные кинковые решения могут быть изучены различными методами. Самым общим методом является неупругое рассеивание нейтронов [77]–[79], которое позволяет измерять вклад кинков в динамический структурный фактор, который является пространственным и временным Фурье преобразованием корреляционной функции спинов. Дополнительная информация может быть получена методом ядерного магнитного резонанса [80]–[83], который измеряет динамический структурный фактор, интегрируемый по всем волновым векторам. Два других метода, рамановское рассеяние [84] и электронный спин-резонанс [82, 85] используются для измерения влияния кинков косвенно через индуцированное солитоном расширение магнитной ширины спектральной линии. Что касается физических систем, то прототипом ФМ цепи, описываемой уравнением СГ, является хорошо известная система CsNiF_3 (см., например, ссылку [77]), а прототипом АФМ цепи является ТММС соединение $(\text{CH}_3)_4\text{NMnCl}_3$ [78].

2.8 Джозефсоновские контакты

Среди многих физических систем, описываемых уравнением СГ, одним из самых естественных примеров является динамика вихрей в длинных джозефсоновских контактах (иначе, джозефсоновских линиях передачи). Кинк в этом случае часто называют “флаксоном”, поскольку он несет квант магнитного потока $\Phi_0 = h/2e = 2.07 \cdot 10^{-15} \text{ Wb}$, движущийся между двумя сверхпроводящими электродами. Имеется несколько обширных обзоров по динамике вихрей в джозефсоновских контактах (ДК) [86]–[88], а некоторые новые исследования отражены в более поздней литературе [89]–[91]. Это активно развивающаяся область исследований, особенно после открытия явления высокотемпературной сверхпроводимости.

Флаксон в ДК несет магнитный поток Φ_0 , созданный циркулирующим в сверхпроводнике током. Этот круговой ток часто называют джозефсоновским вихрем. Он локализован между двумя сверхпроводящими пленками, разделенными слоем диэлектрика толщиной в несколько нанометров. Как было показано МакЛафлиным и Скоттом [86], флаксон соответствует 2π -кинку разности фаз φ волновой функции между двумя сверхпроводящими электродами контакта. Уравнение синус-Гордон с дополнительными слагаемыми, которое описывает динамику системы в нормализованной форме, записывается в следующем виде:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \sin \varphi = -\alpha \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \beta \frac{\partial^3 \varphi}{\partial x^2 \partial t} + \gamma. \quad (2.6)$$

Здесь время t измеряется в единицах ω_0^{-1} , где ω_0 - джозефсоновская плазменная частота, а пространственная координата x измеряется в единицах джозефсоновской глубины проникновения λ_J . Первое диссипативное слагаемое, пропорциональное α , появляется из-за туннелирования квазичастиц (которое обычно предполагается омическим), а второе, пропорциональное β , появляется из-за поверхностного сопротивления сверхпроводников. Постоянный член γ представляет собой нормализованную плотность подмагничивающего тока. Для описания поведения конкретной системы уравнение (2.6) должно решаться с соответствующими граничными условиями, которые зависят от геометрии контакта и учитывают магнитное поле, наложенное в плоскости контакта.

Общим свойством реальных ДК является достаточная малость параметров α , β и γ . Важным решением уравнения (2.6) с нулевой правой частью является кинк $\varphi = 4 \tan^{-1} e^\xi$, где $\xi = (x - vt)/\sqrt{1 - v^2}$. Скорость v определяется балансом между потерями и воздействующими силами, что приводит к $v = 1/\sqrt{1 + (4\alpha/\pi\gamma)^2}$. Флаксон ведет себя подобно релятивистской частице. Его скорость насыщается при больших значениях γ/α и становится близкой к скорости c линейных волн в контакте, называемой скоростью Свихарта в ДК линии.

Флаксоны в слабо взаимодействующих джозефсоновских контактах является объектом интенсивных теоретических и экспериментальных исследований. Впервые динамика флаксонов в двух индуктивно связанных длинных джозефсоновских контактах была теоретически рассмотрена Минеевым и др. [92]. Теория возмущений для слабого взаимодействия была далее исследована Кившарем и Маломедом [27] и Грёнбех-Енсенем и др. [93, 94]. Очень важный шаг к количественному сравнению с реальными экспериментами был сделан Сакаи и др. [95]. Они получили модель для произвольного сильного взаимодействия между контактами. Исследование внутреннего джозефсоновского эффекта в некоторых высокотемпературных сверхпроводниках, таких как $\text{Ba}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+y}$ убедительно показали, что эти материалы являются по существу природными сверхрешетками джозефсоновских контактов, сформированными на атомной шкале [96]–[98]. Пространственный период такой сверхрешетки

составляет только 15 Å, т. е. эти джозефсоновские контакты очень плотно упакованы. Сверхпроводящие электроды были сформированы двойными слоями окиси меди толщиной в 3 Å и отделены друг от друга джозефсоновскими сверхрешетками со многими активными слоями.

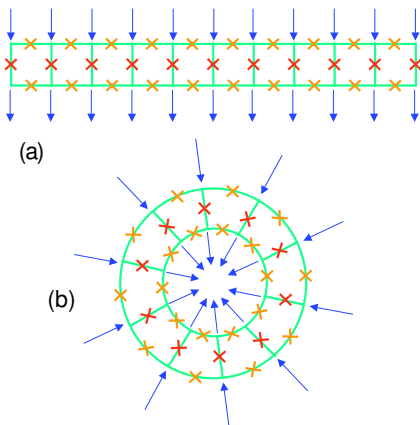


Рис. 2.10. Схематический вид (а) линейных и (б) кольцевых лестниц джозефсоновских контактов. Стрелки обозначают направление приложенного внешнего подмагничивающего тока [99].

Важное применение модели ФК может быть найдено в теории *систем джозефсоновских контактов*, где дискретная цепь эффективных частиц появляется, когда рассматривается магнитный поток в дискретных параллельных системах слабых связей между сверхпроводниками. Сильные эффекты дискретности появляются в случае смещенных систем малых ДК, которые также называют лестницами джозефсоновских контактов. Пример такой системы схематически показан на рис. 2.10, где лестница состоит из демпфированных джозефсоновских туннельных контактов Nb/Al-AlO_x/Nb, и в каждой их ячейки содержится четыре малых джозефсоновских контакта. Такие лестницы могут быть сделаны либо с открытыми, либо с периодическими граничными условиями, как показано на рис. 2.10(a,b), соответственно. Обе эти системы были использованы для изучения локализованных мод – *дискретных бризеров*.

Для того чтобы описать магнитный поток в дискретных параллельных массивах слабых связей между сверхпроводниками, можно использовать модель ФК следующего вида

$$\frac{d^2\varphi_n}{dt^2} = \frac{1}{a^2}(\varphi_{n-1} - 2\varphi_n + \varphi_{n+1}) - \sin\varphi - \alpha\frac{d\varphi_n}{dt} + \gamma, \quad (2.7)$$

где $n = 1, \dots, N$. Это выражение представляет собой уравнения Кирхгофа для электросети из массива N дискретных ДК элементов, связанных через параллельные комбинации сопротивление/индуктор. Фазы на виртуальных точках $n = 0$ и $n = N+1$ определяются через граничные условия. Это модель была проанализирована теоретически Устиновым и др. [100] и их предсказания позже были подтверждены экспериментально Ван дер Зантом и др. [101, 102].

2.9 Нелинейные модели динамики ДНК

Модели типа ФК также играют важную роль в интерпретации определенных биологических процессов, таких как динамика и денатурация макромолекулы ДНК (см., например, ссылки [103]–[108], обзоры Zhou and Zhang [109], Gaeta *et al.* [110] и книгу Якушевич [111]). Структура двойной спиральной цепи ДНК достаточно сложна. Однако наиболее общие свойства макромолекул типа ДНК могут быть описаны Гамильтонианом (1.1)–(1.5), в котором мы предполагаем, что все основания ДНК цепи тождественны.

Одна из первых нелинейных моделей, предложенная для исследования динамики ДНК, обращала внимание на ротационные движения оснований ДНК [112] и фактически сводилась к эквивалентной механической модели, рассмотренной выше. Используя аналогию между ротационным движением оснований нити ДНК и ротационными движениями маятников, Englander *et al.* [112] предположили, что открытое состояние макромолекулы ДНК может быть описано кинковым решением модели ФК. Для того чтобы сделать модель более аккуратной, нужно учесть ротационные движения оснований обоих нитей ДНК, рассмотрев модель, подобную двойному стержню [111].

Так называемая плоская модель торсионной динамики изначально была создана для того чтобы, описать движение кинков, которые должны играть центральную роль в транскрипции ДНК. Одна из таких моделей может быть введена для В конформации молекулы ДНК, фрагмент которой представлен на рис. 2.11. Линии на

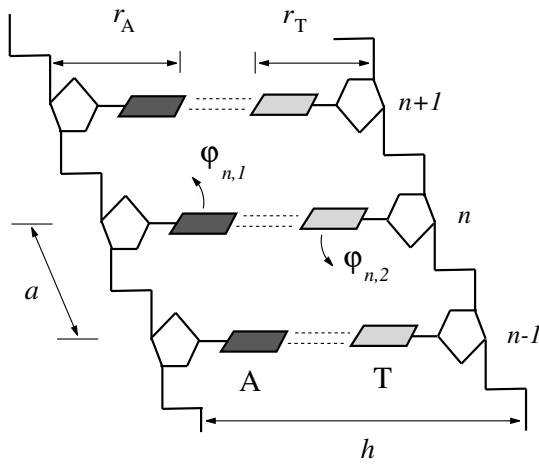


Рис. 2.11. Фрагмент двойной цепи ДНК, состоящий из 3 пар АТ оснований. Продольный шаг цепи $a = 3.4 \text{ \AA}$, поперечный шаг $h = 16.15 \text{ \AA}$.

рисунке соответствуют скелету двойной спирали, а черные и серые прямоугольники соответствуют основаниям в парах (АТ и GC). Эта модель учитывает ротационные движения оснований вокруг сахара-фосфатных цепей в плоскости, перпендикулярной оси спирали (стрелки на рис. 2.11 показывают положительные направления вращения для каждой цепи). Если рассмотреть плоскую модель ДНК, в которой макромолекула формируется двумя прямыми линиями, находящимися на расстоянии h друг от друга, и дополнительно считается что основания могут только вращаться вокруг своей цепи, оставаясь все время перпендикулярными к ней, то положения соседних пар разных цепей будут задаваться только углами вращения.

В простейшем случае уравнение ротационного движения n -го основания первой цепи имеет вид [111]

$$mr^2 \frac{d^2 \phi_{n,1}}{dt^2} = gr^2 (\phi_{n+1,1} + \phi_{n-1,1} - 2\phi_{n,1}) - kr^2 [2 \sin \phi_{n,1} - \sin(\phi_{n,1} + \phi_{n,2})], \quad (2.8)$$

аналогичный вид имеет уравнение движения для второй цепи. Здесь переменные $\phi_{n,1}$ и $\phi_{n,2}$ соответствуют угловым смещениям n -го маятника в первой и второй цепи соответственно, g – жесткость горизонтальной нити, r и m – длина и масса маятника, а параметр k описывает силу взаимодействия между цепями.

Модель (2.8) имеет по крайней мере две группы частных решений, $\phi_{n,1} = \pm \phi_{n,2}$, для которых динамика ДНК снова может быть описана гамильтонианом (1.1)–(1.5), где $x_n^{(i)}$ – обобщенная координата, описывающая основание n i -той цепи двойной спирали. В общем случае модель (2.8) описывает две связанные ФК цепи.

Была также предложена модификация этих моделей, учитывающая винтовую структуру ДНК [110]. В двойной спирали случается, что концы оснований, являющихся половинами соседних пар, могут очень близко подходить друг к другу. Для предотвращения этого в плоскую модель вводится "спиральный" член, добавляющий гармонический потенциал к гамильтониану (1.1)–(1.5) для взаимодействия между основаниями с номерами n and $n + l$. В этом случае в модели вибрационной динамики эти взаимодействия оснований, имеющие более высокий порядок, модифицируют модель ФК для среднего смещения $\psi_n = \frac{1}{2}(x_n^1 + x_n^2)$, делая закон дисперсии линейных волн более сложным. С точки зрения физики, новые спиральные члены создают экстремальные точки в линейной дисперсии, допускающие существование стандартных бризерных мод, т.е. локализованных колебаний, ответственных за локальные открытия двойной спирали.

2.10 Цепи водородных связей

Более глубокие основания для использования модели ФК могут быть получены в случаях, когда атомы, принадлежащие цепи и атомы, создающие внешний потенциал (потенциал подложки) имеют разное физическое происхождение. Например, в так называемых *суперионных проводниках* (см., например, ссылку [113] и также обзоры [114, 115]) анизотропные кристаллические структуры формируют квазиодномерные каналы, вдоль которых ионы могут легко двигаться. Поэтому этот тип моделей можно тоже свести к анализу некоторой одномерной цепи, находящейся под действием эффективного потенциала подложки.

Наиболее важная модель этого типа появляется в теории протонной проводимости цепочек водородных связей. Системы с сеткой водородных связей – это квазиодномерные кластеры молекулярных агрегатов, взаимодействующих со своими соседями через водородные связи. Схематически их можно представить в форме $\cdots \text{X}-\text{H} \cdots \text{X}-\text{H} \cdots \text{X}-\text{H} \cdots \text{X}-\text{H} \cdots$, где отрезки сплошных линий обозначают ковалентные или ионные связи, точечные линии – водородные связи, а X – отрицательный ион. Главная идея простой физической модели такой нелинейной цепи основывается на том факте, что протоны двигаются в двухъямном потенциале, возникающем из водородных связей с решеткой тяжелых ионов (кислородная решетка), которая может деформироваться [116].

Локальная деформация кислородной решетки снижает активационный барьер для протонов, тем самым способствуя их движению. Для того, чтобы описать это явление, одно- или двух-компонентные нелинейные модели должны включать протонную подрешетку, которая допускает существование топологических солитонов (кинков), в то время как кислородная подрешетка может быть промоделирована как другая подрешетка или как некоторый эффективный внешний потенциал для движения протонов. Было предложено несколько моделей этого типа [116]–[121], и они дают простое и эффективное описание протонной подвижности в цепях водородных связей.

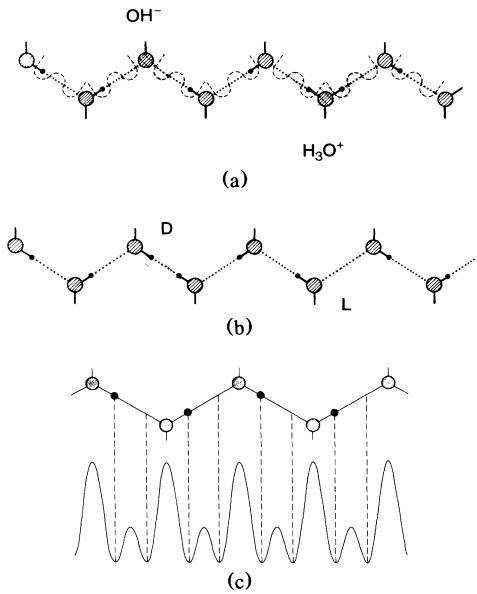


Рис. 2.12. Ионный (а) и ориентационный (бьерумовский) дефект (б) в кристалле льда. Динамика протонов (с) в зигзагообразной двухатомной цепи водородных связей описывается как движение протонов в двухбарьерном периодическом потенциале [121].

В самой низко-уровневой аппроксимации предполагается, что атомы кислорода имеют фиксированные положения и создают эффективный потенциал подложки, действующий надвигающиеся атомы водорода, для которых можно ввести дву-синусоидальную модель ФК (см., например, ссылку [121]) с эффективным потенциалом подложки

$$V_{\text{sub}}(u) = 2V_0 \left[-\sin^2 \left(\frac{u}{2} \right) + 2A \sin^2 \left(\frac{u}{4} \right) \right]. \quad (2.9)$$

Тогда механизм протонной проводимости можно объяснить миграционным транспортом двух типов дефектов, *ионных* и *ориентационных* (или бьерумовских) дефектов, вдоль цепей, как схематически показано на рис. 2.12. В континуальном пределе эти дефекты описываются двумя типами кинков соответствующего уравнения двойной-СГ [121].

Подобный тип *однокомпонентных* моделей систем с водородными связями в континуальном приближении был изучен в работах [122, 123]. Концепции теории индуцированной кинками протонной проводимости включают более общие свойства моделей типа ФК, а именно дискретность протонной цепи и термализованное движение кинков [124], эффекты увеличения протонной проводимости вследствие фазовых переходов соизмеримость-несоизмеримость [125], сложной зигзагообразной структуры цепи [126], изменения масс вдоль цепи [127] и т.д.

Более строго динамику систем, подобных цепям водородных связей, можно описать, введя *две взаимодействующие подрешетки* для протонов и атомов кислорода соответственно. В таком случае нужно будет рассмотреть *двух-компонентное обобщение* модели ФК, которое описывает две взаимодействующие цепи частиц, одна из которых находится под действием потенциала подложки, который создает другая цепь. Несколько моделей этого типа было введено и изучено в континуальном приближении [116]–[121]. Динамика двухкомпонентных моделей имеет несколько новых свойств по сравнению с однокомпонентными моделями. Например, появляется новая ветвь фононного спектра в связанном интервале линейных возбуждений стандартной цепи ФК. В результате, движение кинков будет устойчивым только для малых скоростей, которые не превышают скорости звука акустических фононов кислородной подрешетки [117]. Фактически, вторая фононная ветвь играет важную роль в рассеянии кинков на локальных примесях [128].

Подобные двухкомпонентные модели ФК описывают более реалистически динамику и других объектов, таких как дислокации, краудионы, ад-атомные цепи, цепи ионов в суперионных проводниках и т.д. Во всех таких ситуациях вторая (тяжелоатомная) подсистема соответствует атомам подложки, так что система в целом может снова трактоваться как цепь ФК, находящаяся под действием *деформируемой подложки*. Подобная ситуация имеет место и для физических моделей молекулярных кристаллов и полимерных цепей, так же как и для

ферроэлектрических или ферроэластичных цепей, где ротационные и вибрационные степени свободы являются связанными [129]–[131].

2.11 Модели граничного скольжения

В настоящее время быстро растет интерес к природе силы трения на микроскопическом уровне в области так называемой нанотрибологии [132]. Поскольку сейчас стали доступны данные экспериментов и крупномасштабного моделирования на наноуровне, то начался поиск моделей, правильно интерпретирующих эти результаты. Несколько простых моделей были предложены в надежде получить легко применимые аналитические результаты. В них входят многоуровневые модели с гармоническими взаимодействиями [133, 134], модель Френкеля-Конторовой-Томлисона [135, 136] и одноуровневые модели с гармоническими взаимодействиями и беспорядком [137, 138]. Другие более сложные модели типа ФК были изучены с использованием методов молекулярной динамики [139, 140] (МД). К этой важной задаче можно приблизиться, используя крупномасштабное двумерное МД моделирование, с целью обосновать простую модель трения между двумя плоскими одномерными граничными поверхностями и затем определить ее параметры. Таким образом, модели промежуточного уровня сложности могут быть использованы для обоснования, чтобы оправдать допущения, используемые при получении более простых ФК-типа моделей трения.

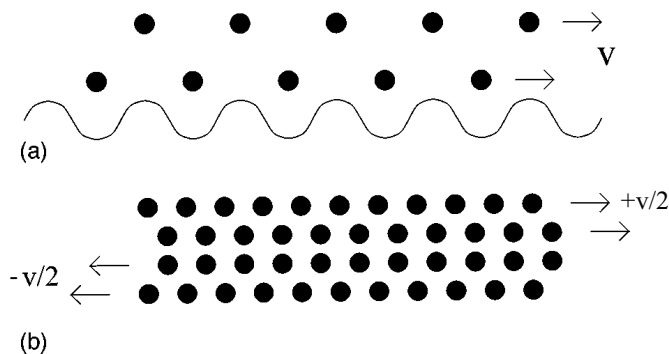


Рис. 2.13. Схематическое геометрическое представление двух типов моделей скольжения поверхностей: (a) упрощенная модель, (b) модель промежуточного уровня сложности [141].

Упрощенная одномерная модель, основанная на нагруженной двухцепочечной модели Френкеля-Конторовой с однонаправленным движением, была предложена в работе [141]. Такая модель демонстрирует многие ключевые свойства крупномасштабных МД экспериментов (например, начально-временное поведение на поверхности раздела, образование и движение дислокаций на этой поверхности, зависимость силы трения от скорости скольжения), в то же время она допускает более очевидный и аналитический подход для интерпретации результатов.

Для получения эффективной модели ФК, Рёдер и др. в работе [141] использовали результаты крупномасштабных МД симуляций и затем заменили нижнюю половину моделируемой системы некоторым эффективным периодическим синусоидальным потенциалом подложки. Рассматривая только два первых уровня атомов, ближайших к поверхности скольжения, и сохраняя треугольную структуру решетки, они заменили верхнюю половину системы эффективным вязким трением движения оставленных атомов. Для того чтобы сделать модель более легкой для теоретического анализа, они ограничили движение атомов одним направлением, параллельным поверхности. Центр масс двух цепей движется с постоянной скоростью v относительно потенциала подложки. Эти упрощения, как показано на рис. 2.13(a), приводят к одномерной двухцепочечной модели типа ФК.

Для дальнейшего оправдания этой модели, Рёдер и др. [141] провели серию МД симуляций промежуточного уровня сложности между крупномасштабными и простыми моделями. В эту серию входила МД симуляция модели, в которой каждая часть системы представлена двумя цепочками, см. рис. 2.13(b). Сравнение поведения этой модели с поведением простой модели ФК позволяет проверить обоснованность замены одной половины системы потенциалом подложки. Было обнаружено, что с точностью до перенормировки скорости скольжения, обе модели дают сходные результаты.

Кинки

В этой главе мы обсуждаем кинки модели ФК. Одним из важных свойств кинков в дискретной решетке, отличающим их от солитонов, является существование обусловленного дискретностью периодического потенциала Пейерлса-Набарро, который оказывает сильное влияние на движение кинков. Мы обсуждаем движущиеся и захваченные состояния кинков, а также их динамику в присутствии беспорядка. Дополнительно мы рассмотрим изменения свойств кинков в обобщенных моделях ФК, включающих потенциал подложки в общей форме и ангармоническое взаимодействие между частицами цепи.

3.1 Потенциал Пейерлса-Набарро

Кинки являются фундаментальными топологическими нелинейными модами модели ФК, именно они ответственны за многие важные физические характеристики цепи связанных частиц на подложке. Многие свойства кинков и их существование как топологических состояний цепи не зависят существенно от дискретности первичной модели, так что приближение, основанное на непрерывной модели СГ, часто является вполне допустимым при описании свойств кинков в дискретной модели ФК, сохраняющим основные динамические свойства системы. Однако, очень специфическим свойством дискретной решетки является существование так называемого периодического потенциала Пейерлса-Набарро (ПН) $V_{PN}(X)$ (где X – координата центра кинка), оказывающего влияние на движение кинков. Исторически, потенциал ПН и его свойства впервые обсуждались в контексте теории дислокаций кристалла [142]–[145].

Для того чтобы понять, как при анализе движения кинков возникает концепция потенциала ПН, сразу заметим, что в континуальном приближении система становится инвариантной к любой трансляции кинка вдоль цепи (такие трансляции возможны из-за существования так называемой голдстоуновской моды в спектре возбуждений кинка). В противоположность этому, такая инвариантность отсутствует в дискретных моделях; здесь допустимы только сдвиги кинка на шаг решетки a_s и на его кратные значения. Наименьший энергетический барьер, который кинк должен преодолеть для начала движения, называется барьером ПН E_{PN} . В дискретном случае, трансляционная голдстоуновская мода, имеющая нулевую частоту, заменяется конечно-частотной локализованной модой, называемое модой ПН. Энергетический барьер ПН E_{PN} соответствует разнице между двумя значениями потенциальной энергии кинка в двух его стационарных конфигурациях, устойчивой и неустойчивой (седловой) [см. рис. 3.1(а,б)]. Первое состояние, показанное на рис. 3.1(а), характеризуется стационарной конфигурацией связанных частиц, соответствующей минимуму энергии, с кинком, расположенным в минимуме ПН потенциального рельефа $V_{PN}(X)$. Второе состояние, показанное на рис. 3.1(б), соответствует неустойчивой конфигурации, когда кинк находится на одном из максимумов энергетического рельефа ПН.

Потенциальная энергия цепи с одним кинком $U(\dots, u_{n-1}, u_n, u_{n+1}, \dots)$ является функцией координат всех атомов цепи. Стационарное состояние, показанное на рис. 3.1(а), соответствует некоторому минимуму функции U , в то время как состояние, показанное на рис. 3.1(б), соответствует седловой точке функции U , которая расположена между двумя соседними минимумами в N -мерном координатном пространстве, где N – число атомов в цепи ($N \rightarrow \infty$). Седловую точку и соседние точки минимумов в конфигурационном пространстве можно связать так называемой *адиабатической траекторией*, т.е. кривой, которая задает решение системы связанных уравнений

$$\frac{du_n(\tau)}{d\tau} = -\frac{\partial}{\partial u_n} U(\dots, u_{n-1}, u_n, u_{n+1}, \dots), \quad (3.1)$$

где τ – некоторый параметр, характеризующий траекторию. Эта траектория является кривой наискорейшего спуска, которая описывает адиабатически медленное движение кинка вдоль цепи. Заметим, что когда система помещена в низкотемпературный термостат, кинк будет двигаться преимущественно вдоль адиабатической

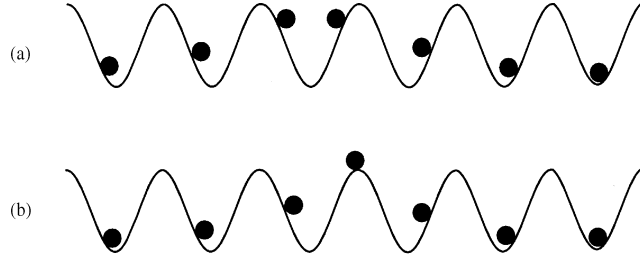


Рис. 3.1. Две стационарные конфигурации связанных частиц в модели ФК, соответствующие одному кинку цепи: (а) устойчивая, соответствующая минимуму, и (б) неустойчивая, соответствующая седловой точке ПН потенциального энергетического рельефа.

траектории. При конечных скоростях, движение кинка будет слабо отличаться от движения вдоль адиабатической траектории.

Следовательно, ПН потенциал для двигающегося вдоль дискретной цепи кинка можно представить в форме

$$V_{PN}(X) = U(\dots, u_{n-1}, u_n, u_{n+1}, \dots) \Big|_{x \in \text{адиабат. троек}}. \quad (3.2)$$

Для того что бы ввести коллективную координату X , описывающую движение центра кинка, мы представим координаты атомов в виде

$$u_n = f(na_s - X), \quad (3.3)$$

где функция $f(x)$ задает профиль кинка. В континуальном приближении, т.е. при $g \gg 1$, функция $f(x)$ совпадает с функцией (1.19) для СГ кинка. В дискретном случае функция $f(x)$ отличается от формы СГ кинка и может быть представлена в форме, $f(x) = u_k^{(SG)}(x) + \Delta u_{ad}(x)$, где функция $\Delta u_{ad}(x)$ называется “адиабатической обложкой” кинка. Используя уравнение (3.3), координату центра кинка можно определить как [146]

$$X = -\frac{\sigma}{a_s} \int x f'(x - X) dx, \quad (3.4)$$

где $f'(x) = df(x)/dx$. При численном моделировании системы с одним изолированным кинком более удобно определить координату X , интегрируя уравнение (3.4) по частям, для того чтобы получить $X = \sigma \sum_n u_n + C$, где постоянная интегрирования C определяется так, чтобы точка $X = 0$ соответствовала положению кинка в минимуме ПН потенциала (например, на узле $n = 0$).

Амплитуда E_{PN} ПН потенциала была вычислена во многих работах, в квази-континуальном пределе [147]–[154], для предела слабых связей [155, 156], так же и непосредственно прямыми вычислениями [154, 155], [157]–[161]. Для того что бы оценить величину ПН потенциального барьера, подставим уравнение (3.3) в потенциальную энергию U и опустим добавочный адиабатический член к СГ кинковой форме, т.е. возьмем $f(x) = u_k^{(SG)}(x)$. Тогда, приблизительно, u_{n+1} будет иметь вид

$$u_{n+1} \approx u_n + a_s f'_n, \quad f'_n = \frac{df(z)}{dz} \Big|_{z=(na_s - X)}. \quad (3.5)$$

Используя формулу суммирования Пуассона и сохраняя только члены, соответствующие первой гармонике, мы получим следующий результат [149]

$$V_{PN}(X) \approx \sum_{l=0}^{\infty} B_l \cos(lX) \approx \frac{1}{2} E_{PN} (1 - \cos X), \quad (3.6)$$

где

$$B_l = \frac{16\pi^2 l g}{\sinh(l\pi^2 \sqrt{g})} \left(l^2 + \frac{1}{2\pi^2 g} \right), \quad l \geq 1, \quad (3.7)$$

так что “голый” ПН потенциал для случая $g \gg 1$ задается выражением

$$E_{PN}^{(0)} = \frac{32\pi^2 g}{\sinh(\pi^2 \sqrt{g})} \left(1 + \frac{1}{2\pi^2 g} \right) \approx 64\pi^2 g \exp(-\pi^2 \sqrt{g}). \quad (3.8)$$

Кинетическую энергию движущегося с малой скоростью $v \equiv dX/dt \ll c$ вдоль адиабатической траектории кинка можно представить в виде

$$K_k = \frac{1}{2} \sum_n \left(\frac{du_n}{dt} \right)^2 = \frac{m}{2} \left(\frac{dX}{dt} \right)^2, \quad (3.9)$$

где эффективная масса кинка определяется простейшим способом

$$m(X) \equiv \sum_n \left(\frac{du_n}{dX} \right)^2 = \sum_n (f')^2. \quad (3.10)$$

Подставив форму СГ кинка $f(x) = u_k^{(SG)}(x)$ в уравнение (3.10), для $g \gg 1$ мы получим следующий результат [152],

$$m(X) \approx m^{(SG)} + \sum_{l=1}^{\infty} A_l \cos(lX), \quad (3.11)$$

где

$$A_l = \frac{4l}{\sinh(l\pi^2\sqrt{g})}. \quad (3.12)$$

Влияние на форму кинков эффектов дискретности более высокого порядка было изучено численно в работах [150, 152, 154, 159], а также аналитически в [154], [160]–[162].

В случае сильной связи, т.е. при $g \gg 1$, мы можем применить метод, впервые предложенный Розенау [7]. Этот метод позволяет убрать сингулярности в спектре и приводит к следующему уравнению первого порядка по параметру дискретности $\lambda = \frac{1}{12}(a_s/d)^2 \ll 1$,

$$\sin u - \frac{d^2u}{dx^2} = \lambda \left[\left(\frac{du}{dx} \right)^2 \sin u - \frac{d^2u}{dx^2} \cos u \right]. \quad (3.13)$$

Локализованное решение этого уравнения можно легко найти при помощи теории возмущений [27], и такая поправка имеет форму

$$\Delta u_{\text{ad}}(z) \approx -\lambda \sigma \frac{(3 \tanh z - z)}{\cosh z}. \quad (3.14)$$

Как следует из этого результата, приведенная ширина дискретного кинка $d \rightarrow d_{\text{eff}} = d(1-\lambda)$. Такой же результат численно впервые был получен Кури и др. [159] и Виллисом и др. [152]. Ясно, что уменьшение ширины кинка должно приводить к увеличению величины энергетического барьера ПН E_{PN} , в соответствии с уравнением (3.8) этот рост можно оценить как следующий

$$\Delta E_{PN} \approx \frac{2d\Delta d}{a_s^2} \frac{dE_{PN}^{(0)}}{dg} = -2\lambda g \frac{dE_{PN}^{(0)}}{dg}. \quad (3.15)$$

Аналитическое определение E_{PN} в пределе континуального приближения является не простой задачей, так как в стандартной схеме теории возмущений любое изменение кинка вносит свой вклад в E_{PN} во всех порядках теории возмущений [161]. Оригинальный подход для решения этой задачи был предложен Флахом и Кладко [154]. Он состоит в переписывании разностного уравнения в дискретных переменных u_n ,

$$g(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) - V'_{\text{sub}}(u_n) = 0, \quad (3.16)$$

как дифференциального уравнения для непрерывной функции $u(x)$,

$$ga_s^2 \frac{d^2u}{dx^2} - V'_{\text{sub}}(u) = [\rho(x) - 1] V'_{\text{sub}}(u), \quad (3.17)$$

где

$$\rho(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na_s) = a_s \left[1 + 2 \sum_{k=1}^{\infty} \cos\left(\frac{2\pi kx}{a_s}\right) \right], \quad (3.18)$$

и затем в рассмотрении правой части уравнения (3.17) как малого возмущения уравнения СГ. Результат приближения первого порядка теории возмущений может быть найден как решение уравнения СГ с оригинальным потенциалом подложки V_{sub} , замененным на эффективный потенциал

$$V_{\text{eff}} = V_{\text{sub}} - \frac{1}{24g} \left(\frac{a_s}{2\pi} V'_{\text{sub}} \right)^2. \quad (3.19)$$

Этот подход в дальнейшем был развит Кладко и др. [163] (см. также дискуссию в работе Кеврекидеса и др. [164]). В частности, экспоненциальный множитель в уравнении (3.8) должен быть подправлен как

$$\exp(-\pi^2 \sqrt{g}) \rightarrow \exp\left(-\pi^2 \sqrt{g}/\sqrt{1-1/12g}\right).$$

Как будет показано далее в главе 5, уравнение (3.16) для стационарных конфигураций можно свести к стандартному отображению Тейлора-Чирикова для некоторой вспомогательной двухмерной динамической системы, и поэтому стационарные решения уравнения (3.16) соответствуют многообразию траекторий отображения. В частности, кинки соответствуют двум гомоклиническим орбитам стандартного отображения, устойчивому и неустойчивому многообразиям. В точно интегрируемом уравнении СГ эти многообразия перекрываются; но в дискретной системе ФК они различны и характеризуются разными энергиями. Разница между этими энергиями определяет ПН энергетический барьер, он также определяется углом пересечения многообразий в точке, ближайшей к середине расстояния между фиксированными точками. Этот угол был вычислен Лазуткиным и др. [153] в пределе $g \rightarrow \infty$, и это приводит к следующему результату для ПН энергии

$$E_{PN} = Ag \exp(-\pi^2 \sqrt{g}), \quad (3.20)$$

где численный множитель $A = 712.26784\dots$ Сравнивая этот точный результат с "голой" ПН энергией, определенной в уравнении (3.8), мы находим, что в пределе сильного взаимодействия обложка кинка приводит к возрастанию энергии ПН в 1.13 раз.

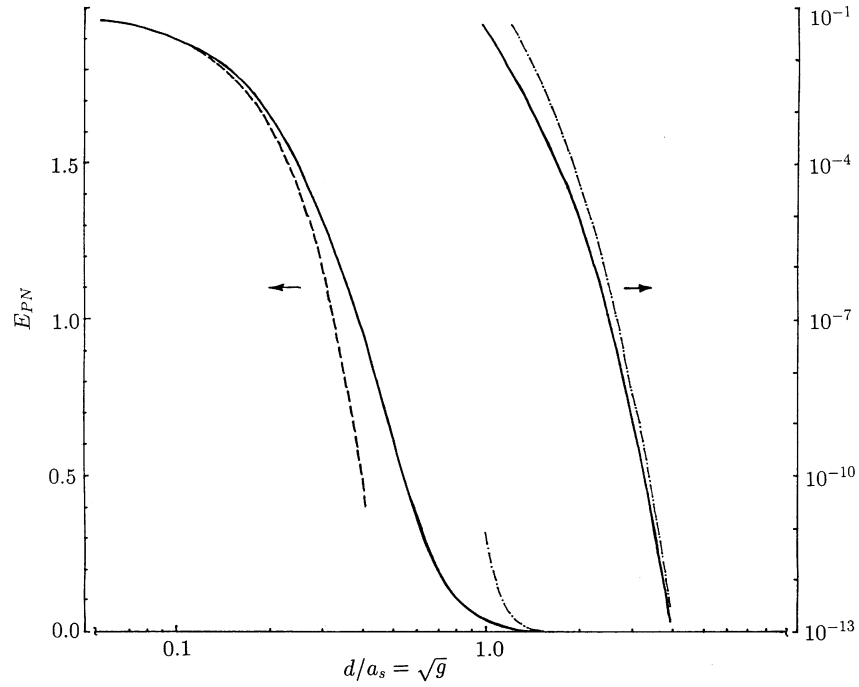


Рис. 3.2. Зависимость максимума потенциального рельефа ПН E_{PN} от нормализованной ширины кинка $d/a_s = \sqrt{g}$. Сплошные линии: численные результаты Джоса [155] и Станциофа и др. [160]; пунктирные: результат приближения слабого взаимодействия; пунктирно-точечные: результат непрерывного приближения.

В противоположном случае слабого взаимодействия, $g \ll 1$, параметры кинка могут быть вычислены в самом простом приближении, если мы пренебрежем смещениями атомов от минимумов потенциала подложки для всех частиц, кроме находящихся в ядре кинка. Это приводит к следующим выражениям (см. ссылки [155, 165]): $m \approx 1$, $\varepsilon_k \approx 2\pi^2 g(1-2g)$ и $E_{PN} \approx 2 - \pi^2 g$.

Более аккуратные результаты можно получить при помощи теории единственной активной ячейки, развитой Кладко и др. [163]. В этом подходе, атомы вблизи ядра кинка рассматриваются точно, в то время как все остальные атомы описываются линеаризованным уравнением (3.16) в предположении, что их смещения из минимумов потенциала подложки малы. После этого два решения, одно для атомов ядра кинка и другое для всех остальных атомов, согласуются друг с другом. Этот подход приводит к следующему результату для силы ПН,

$$F_{PN} \approx \left[(2z - 4g - 1)^{1/2} - f(g) \cos^{-1} f(g) \right] [1 + f(g)]^{-1}, \quad (3.21)$$

где $z \equiv \sqrt{1+4g}$ и

$$f(g) = 2 \left\{ 1 - \frac{(1+g)}{(1+2g+z)} \right\}. \quad (3.22)$$

Фуруя и Озорио де Алмеида [156] с целью вычисления энергий ε_k и E_{PN} в случае $g < 1$ использовали подход стандартного отображения. Они показали, что минимальное по энергии состояние, показанное на рис. 3.1(a), характеризуется энергией

$$\varepsilon_k \approx 2 \left[1 - \cos \left(\frac{2\pi g}{1+3g} \right) \right] + \frac{g}{2} \left[2\pi \frac{(1+g)}{(1+3g)} \right]^2. \quad (3.23)$$

Седловое состояние, показанное на рис. 3.1(b), имеет энергию

$$\varepsilon_{\text{saddle}} = \varepsilon_k + E_{PN} \approx 2(2 - \cos \beta) + \frac{g}{2} \left[\pi^2 + \left(\beta + \frac{1}{\beta} \sin \beta \right)^2 \right], \quad (3.24)$$

где

$$\beta = \frac{2\pi g}{(1+2g) + \sqrt{1+4g}}.$$

Зависимость E_{PN} от параметра $d/a_s \equiv \sqrt{g}$ показана на рис. 3.2.

Влияние дискретности цепи на взаимодействие двух кинков было проанализировано численно Джосом [155]. Был показан экспоненциальный закон кинк-кинкового взаимодействия

$$v_{\text{int}}^{(FK)}(R) = A e^{-\gamma R/d}, \quad (3.25)$$

действующий для расстояний $R > 3a_s$ и для любого значения параметра g , хотя коэффициенты A и γ при $g < 5$ зависят от g ; в частности, для $g \rightarrow 0$, $A(g) \approx 4\pi^2 g$ (см. ниже главу 5). Присутствие кинка в цепи изменяет плотность фононных состояний системы [166], этот эффект важен в задачах статистической механики задачи ФК и будет обсуждаться далее в главе 6.

3.2 Динамика кинков

3.2.1 Эффективное уравнение движения

В дискретной модели ФК не существует решения, соответствующего стационарному состоянию кинка, двигающегося с постоянной скоростью. Из-за дискретности решетки движущийся кинк излучает линейные волны (фононы). Это один из основных физических эффектов, объясняющих потери энергии дислокаций на излучения, обнаруженные для различных (более реалистичных) дискретных моделей [167]–[170].

Для кинка, двигающегося в цепи ФК, эффекты излучения были изучены численно несколькими группами. Основываясь на всесторонних численных результатах Кури и др. [159], мы можем обсудить общие свойства динамики ФК кинков в дискретных цепях. Действительно, если мы начнем с начальной конфигурации с граничным условием, соответствующим кинку, т.е. возьмем одно-кинковое решение уравнения СТ с некоторой начальной скоростью, $u_{n \rightarrow -\infty} = 0$ и $u_{n \rightarrow +\infty} = -\sigma a_s$, то такая конфигурация никогда не выйдет на устойчивое состояние. В начале это состояние преобразуется в излучение и одинарный "одетый" кинк, т.е. в кинк с модифицированной дискретностью решетки формой. В результате, кинк будет распространяться по цепи не свободно, но с осциллирующей скоростью, осцилляции возникают из-за дискретности решетки. Двигаясь с изменяющейся скоростью, такой кинк теряет свою кинетическую энергию на излучение фононов и, в конечном счете, он будет захвачен ПН потенциалом, когда его скорость станет ниже некоторого критического значения v_{PN} . Кинк, захваченный потенциалом ПН, осциллирует вблизи минимума потенциальной ямы, непрерывно излучая фононы и все более приближаясь к стационарному состоянию, соответствующему стационарной конфигурации.

Такое поведение можно легко понять в рамках простой физической модели эффективной частицы массы m , двигающейся в периодическом потенциале, когда ее общая энергия определена как

$$E = \frac{m}{2} \left(\frac{dX}{dt} \right)^2 + V_{PN}(X). \quad (3.26)$$

Если энергия E превосходит энергетический барьер ПН, соответствующий максимуму потенциала $V_{PN}(X)$, то частица будет двигаться вдоль цепи и ее положение будет задаваться уравнением

$$X(t) = 2 \operatorname{am}(\omega_{PN} t / k; k), \quad (3.27)$$

где $k = \sqrt{E_{PN}/E}$ – модуль эллиптической функции Якоби. Скорость частицы будет периодически изменяться вблизи среднего значения с частотой

$$\omega_{\text{trav}}(E) = \frac{\omega_{PN}}{2kK(k)} = \left\langle \frac{dX}{dt} \right\rangle \left(\frac{2\pi}{a_s} \right), \quad (3.28)$$

обусловленной периодическим рельефом ПН.

В другом случае, когда $0 < E < E_{PN}$, эффективная частица (кинк) остается захваченной одним из минимумов периодического потенциала, и координаты частицы будут осциллировать согласно закону

$$X(t) = 2 \sin^{-1}[\tilde{k} \operatorname{sn}(\omega_{PN}t; \tilde{k})], \quad (3.29)$$

где на этот раз модуль эллиптической функции $\tilde{k} = \sqrt{E/E_{PN}} = k^{-1}$. Частота осцилляций кинка дается выражением

$$\omega_{\text{trap}}(E) = \frac{\pi\omega_{PN}}{2K(\tilde{k})}, \quad (3.30)$$

так что $0 < \omega_{\text{trap}}(E) < \omega_{\text{trap}}(0) \equiv \omega_{PN}$, где

$$\omega_{PN}^2 = \frac{1}{m} \left(\frac{d^2 V_{PN}(X)}{dX^2} \right) \Big|_{X=0} \approx \frac{E_{PN}}{2m} \quad (3.31)$$

есть частота гармонических колебаний вблизи минимума потенциала ПН, которую называют частотой ПН.

Для дискретной ФК цепи общая энергия кинка E не является сохраняющейся величиной из-за обусловленной нелинейностью его взаимодействия с различными модами, включая фононы. Поэтому движение кинка по цепи может быть описано при помощи модели эффективной частицы только приближенно, и такая динамика должна быть модифицирована дополнительными процессами возбуждения фононных мод. Действительно,двигающийся по цепи с меняющейся скоростью кинк или кинк захваченный дискретностью решетки и осциллирующий вблизи минимума потенциала ПН, производит эффективную осциллирующую силу на фононную подсистему с частотами $n\omega_{\text{trav}}$ или $n\omega_{\text{trap}}$ ($n = 1, 2, \dots$), соответственно. Такая осциллирующая сила генерирует фононы, поэтому энергия кинка убывает, трансформируясь в энергию возбужденных фононных мод. Для учета этого, введенную выше феноменологию эффективной частицы нужно модифицировать добавлением эффективной силы трения

$$F^{(\text{fr})} = -m\eta \frac{dX}{dt}, \quad (3.32)$$

которая обеспечит окончательный захват кинка потенциалом ПН. Эффективный коэффициент вязкого трения η в уравнении (3.32) является сложной функцией параметров системы, эта зависимость будет обсуждаться далее в параграфе 7.2.

Адиабатическая динамика кинка в дискретной ФК цепи была проанализирована аналитически Ишимори и Мунаката [150] с использованием теории возмущения солитонов, развитой ранее МакЛафлином и Скоттом [86], для случая когда эффекты дискретности малы, т.е. $\lambda = (1/12)a_s/d)^2 \ll 1$. Ишимори и Мунаката [150] вычислили эффективное трение из-за излучения фононов и показали, что движущийся кинк излучает фононы преимущественно в направлении, обратном к движению. Более тщательное исследование динамики кинка в дискретной ФК цепи было проведено Пейраром и Крускалом [171], Бушем и др. [172] при помощи численного моделирования. Некоторые результаты этих исследований представлены ниже на рис. 3.3 и 3.4; они показывают изменение скорости кинка в случаях двигающегося и захваченного состояний.

До обсуждения свойств, обнаруженных при численном моделировании, мы введем плотность фононных состояний $\rho(\omega)$, определенную в одномерной решетке как (см., напр., ссылку [173])

$$\rho(\omega) = \frac{2}{\pi} \frac{\omega}{\sqrt{(\omega^2 - \omega_{\min}^2)(\omega_{\max}^2 - \omega^2)}} \quad (3.33)$$

с условием нормировки

$$\int_{\omega_{\min}}^{\omega_{\max}} d\omega \rho(\omega) = 1.$$

Функция $\rho(\omega)$ стремится к бесконечности на концах зоны фононного спектра $\omega_{\min}$ и $\omega_{\max}$.

Ангармонические колебания решетки приводят к возбуждению гармоник высшего порядка в фононном спектре. Это может происходить вследствие изменения эффективной энергии двигающегося или захваченного кинка при выполнении следующих условий резонанса

$$k_1\omega_k = k_2\omega_{\text{ph}}(\kappa), \quad (3.34)$$

где ω_k соответствует частоте ω_{trav} или ω_{trap} в зависимости от типа движения кинка в цепи, а целые числа k_1 и k_2 отвечают за порядок резонанса. Эффективное трение будет наибольшим за счет резонансного переноса энергии в фононную подсистему при $k_1 = k_2 = 1$ и частоте ω_{ph} , близкой к одному из концов фононного спектра, где плотность фононов имеет максимальные значения. В следующем параграфе мы обсудим более детально результаты численного моделирования для движущихся и захваченных кинков.

3.2.2 Движущиеся кинки

Мы в начале изучим общие свойства динамики быстрых кинков в дискретной цепи. Типичный пример эволюции кинка, демонстрирующий изменение его скорости, представлен на рис. 3.3. Он основан на численных результатах Пейрара и Крускала [171]. Быстрый кинк запускается на некоторой (относительно большой) скорости $v_0 < c$. Его скорость быстро понижается с начального значения к "критическому" значению v_1 в течение некоторого временного интервала t_1 – см. рис. 3.3 (критическая скорость v_1 является функцией начальной скорости v_0). Для $t < t_1$, когда $v > v_1$, выполняется неравенство

$$\omega_{\min} < \omega_{\text{trav}} < \omega_{\max}, \quad (3.35)$$

это условие объясняет высокую степень энергетических потерь, наблюдаемых при численном моделировании.

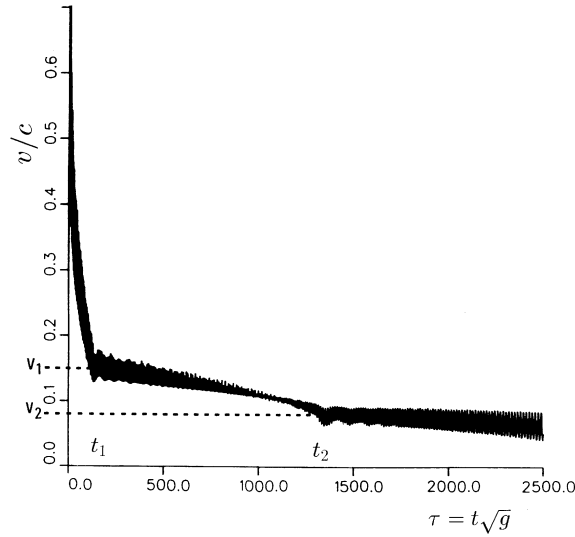


Рис. 3.3. Изменение скорости кинка в ФК цепи с $\sqrt{g} = 0.95$. В начальный момент в цепи возбуждается кинк со скоростью $v_0 = 0.8c$. Пунктирные линии показывают исчезновение резонансов $k_1 = k_2 = 1$ (при $t = t_1$) и $k_1 = 2, k_2 = 1$ (при $t = t_2$) [171].

Однако в точке $t = t_1$ резонанс первого порядка исчезает и вызванное излучением торможение кинка теперь становится связанным только с результатом резонанса второго порядка ($k_1 = 2, k_2 = 1$). Время перехода t_1 четко наблюдается при численном моделировании как точка, где эффективное трение η резко понижается (см. рис. 3.3). Соответственно, излучение кинка становится меньше и средняя скорость движения кинка убывает значительно медленнее.

Аналогично, при $t = t_2$ (т.е. когда скорость кинка пересекает значение $v_k = v_2$) исчезает резонанс второго порядка (т.е. резонансное условие перестает выполняться) и при $t > t_2$ скорость кинка меняется даже еще медленнее (см. рис. 3.3). Позднее кинк захватывается ПН рельефом в некоторый момент времени $t = t_{\text{trap}}$, когда кинетическая энергия кинка достигает значения, соответствующего энергии ПН $E = E_{PN}$. Численные эксперименты, проведенные различными группами показывают, что в случае $g \gg 1$ временной интервал до захвата кинка t_{trap} очень большой. Однако это время t_{trap} становится много меньшим для узких кинков, например при $\sqrt{g} = 0.75$ кинк с начальной скоростью $v_0 = 0.8c$ не может пройти больше двух шагов цепи, в результате этого он почти сразу захватывается дискретностью решетки. Очень похожее поведение кинка наблюдали Комбс и Ип [174] для динамики кинка в дискретной модели ϕ^4 .

3.2.3 Захваченные кинки

Эволюция захваченных кинков была проанализирована численно, в частности, Бушом и др. [172]. Результаты, показанные на рис. 3.4, могут быть объяснены способом, аналогичным случаюдвигающегося кинка, учитывая структуру фононного спектра и плотность фононных состояний.

Во первых заметим, что частота осцилляций захваченного кинка ω_{trap} меняется от нулевого значения до своего максимального значения ω_{PN} . Когда частота ω_{trap} растет, порядок резонансов с фононными модами понижается, для определенных гармоник становится возможным пересечение с граничной частотой фононного спектра, обеспечивающее выполнение условия резонанса, даже если в начальный момент времени оно не выполнялось. Следовательно, излучение кинком фононов должно возрастать. Однако, в типичной ситуации величина частоты ПН, являющейся функцией параметра решетки g

$$\omega_{PN}(g) \approx \left\{ \frac{2\pi^6}{3} \frac{g\sqrt{g}}{\sinh(\pi^2\sqrt{g})} \left(1 + \frac{1}{2\pi^2 g} \right) \right\}^{1/2}, \quad (3.36)$$

много меньше граничной частоты фононной зоны $\omega_{\min} = 1$, и поэтому такой кинк может излучать фононы только за счет гармоник высокого порядка, т.е. за счет гармоник, соответствующих большим числам условия резонанса (3.34). Например, частота ПН вычисленная по формуле (3.36) при $g = 1$ имеет значение $\omega_{PN} \approx 0.18$ (строгая процедура вычисления частоты ω_{PN} была предложена Бушом и Виллисом [175], см. также ссылку [176]) и для резонансного генерирования фононов осциллирующим кинком необходимо в уравнении (3.34) выполнение условия $k_2 \geq 6$. Медленно изменяя свою частоту, кинк резко увеличивает интенсивность излучения, когда его частота (или частоты более высокой гармоники) пересекает границу фононного спектра, где плотность фононных состояний максимальна. Это приводит к особенностям во временной эволюции координаты кинка, показанной на рис. 3.4.

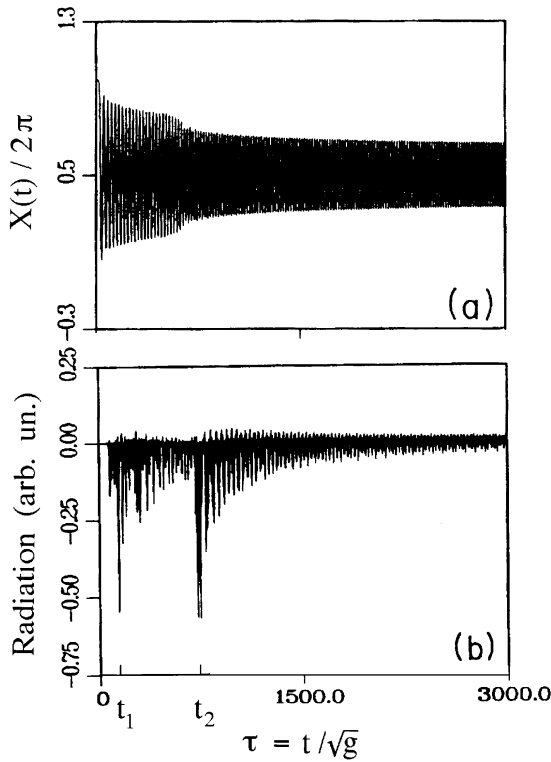


Рис. 3.4. Численные результаты для (а) осцилляций координаты кинка $X(t)$ и (б) мгновенный поинтинговый поток излучения фононов вдали от кинка, захваченного потенциалом ПН для цепи ФК с $g = 0.791$. Легко заметить появление новых резонансов с $k_1 = 5$, $k_2 = 1$ (при $t = t_1$) и $k_1 = 4$, $k_2 = 1$ (при $t = t_2$) [172].

Аналитические результаты для оценки обусловленного излучением коэффициента трения η довольно длинны и сложны для их детального обсуждения. Однако, мы должны упомянуть, что первое аналитическое вычисление излучения кинка было проведено Ишимори и Мунаката [150]. Это вычисление было основано на приближении первого порядка солитонной теории возмущения, но конечные результаты не воспроизводили хорошо динамические свойства кинков, наблюдаемые при численном моделировании. Грубые оценки Пейрара и Крускала [171] хорошо согласуются с соответствующими численными результатами, и следовательно они являются более точными. Позже Виллис и др. [152] предложили строгую процедуру (см. также ссылку [177], где для нахождения эффективного трения была развита техника проекционных операторов, и работу Ишимори и Мунаката [178]). Основной идеей их подхода является нахождение кинковых решений в дискретном случае в виде $u_n(t) =$

$f[na_s - X(t)] + q_n(t)$ и развитие гамильтонова формализма для координаты кинка $X(t)$ и сопряженного с ней момента $P(t) = m(t)(dX/dt)$, которые трактуются как канонические переменные, *выделенные* из полного множества переменных дискретной модели ФК. Переменные $q_n(t)$ и соответствующие моменты $p_n(t) = dq_n/dt$ описывают область излучения и отклонение формы кинка от соответствующего аналитического решения, полученного в континуальном приближении. Введение этих двух новых канонических переменных требует выполнения двух ограничений

$$C_1 \equiv \sum_n f'_n q_n = 0 \quad \text{и} \quad C_2 \equiv \sum_n f'_n p_n = 0, \quad (3.37)$$

а также модификации скобок Пуассона $\{X, P\} = 1$ и $\{q_n, p_m\} = \delta_{n,m}$. Уравнения движения затем получаются в соответствии с Гамильтоновым формализмом: $d\theta/dt = \{\theta, H\}$, где θ обозначает одну из канонических переменных X, P, q_n и p_n , а частота ПН затем находится при линеаризации этих уравнений для малоамплитудных колебаний. Описанная процедура дает отличное согласие с численным моделированием и учитывает эффективную ренормализацию формы кинка из-за сильной дискретности ФК модели.

3.2.4 Кратные кинки

Для слабого взаимодействия, т.е. для $g \leq g_{4\pi} \approx 0.2025$, отталкивание между кинками тоже слабо, поэтому оно может соперничать с притягивающей силой эффективного ПН потенциала. Так, два (или даже больше) кинка могут быть захвачены дискретностью решетки, образуя связанное состояние,двигающееся как единый мультикинк. Такие 4π -кинки, также как и 6π -кинки, были впервые обнаружены численно Пейраром и Крускалом [171], которые показали, что такие мультикинковые структуры довольно устойчивы, чтобы быть легко обнаруженными при численном моделировании. Пейрар и Крускал [171] нашли, что скорость такого связанного состояния кинков не является произвольной, она зависит от значения параметра цепи g . На рисунке 3.5 показаны численные результаты для скорости 4π - и 6π -кинок, обозначенных соответственно как $v_{4\pi}$ и $v_{6\pi}$. Неожиданно оказалось, что при больших скоростях $v \sim c$ такие мультикинки остаются устойчивыми даже при $g > g_{2n\pi}$, где $g_{2n\pi}$ – критическое значение постоянной жесткости, ниже которой n *стационарных* 2π -кинок могут быть захвачены вместе как мультикинк в одной впадине ПН потенциала (значение $g_{2n\pi}$ зависит от порядка мультикинка n). Более того, эффективный коэффициент трения для таких типов мультикинковых решений становится пренебрежимо малым и позволяет мультикинку двигаться по решетке без заметных потерь на излучение.

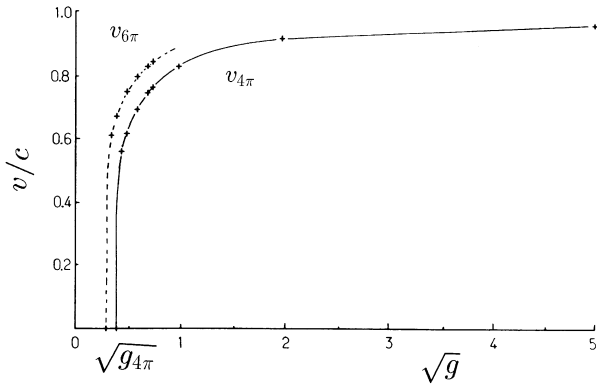


Рис. 3.5. Скорости $v_{4\pi}$ (сплошная кривая) и $v_{6\pi}$ (пунктирная кривая) 4π - и 6π -кинок как функции параметра $\sqrt{g} = d/a_s$ в ФК модели [171].

Полное понимание причин существования мультикинков в дискретных решетках при больших скоростях в значительной степени все еще остается открытой проблемой, однако ясно, что такие состояния становятся возможными из-за лоренцовского сокращения ширины кинка при больших скоростях. Для очень узких кинков эффекты дискретности играют главную роль. "Первый" 2π -кинк мультикинковой конфигурации производит позади себя сильное излучение, которое помогает следующему за ним кинку преодолевать ПН барьеры. Таким образом, стабильность кратного кинка можно объяснить как результат "компенсации" волн, излучаемых составляющими кинками, когда эти волны находятся в противофазе. Волны гасят друг друга, так что составной двойной кинк движется почти без излучения фононов.

Двойные 4π -кинки были изучены численно Савиным и др. [179] при помощи так называемого псевдоспектрального метода [180]. Этот метод позволяет найти численно все решения, имеющие вид бегущей волны с постоянной скоростью v . Решение этого типа может быть записано в форме $u_n(t) = u(na_s - vt) \equiv u(z)$, где континуальная переменная $z = na_s - vt$. Тогда уравнения движения (1.9) сводятся к следующему дифференциально-разностному уравнению

$$v^2 \frac{d^2 u}{dz^2} + \sin u(z) - g [u(z + a_s) + u(z - a_s) - 2u(z)] = 0. \quad (3.38)$$

Его решения можно искать в виде конечных рядов Фурье

$$u(z) \approx u_0(z) + \sum_{j=1}^M c_j \psi_j(z), \quad (3.39)$$

где $u_0(z)$ – некоторая пробная функция с подходящими граничными условиями [например, для 4π -кинка можно взять $u_0(z) = 8 \tan^{-1} \exp(z/d)$], $\psi_j(z) = \sin(2\pi j z/L)$, и $L = Na_s$ – общая длина ФК цепи с периодическими граничными условиями. Подстановка выражения (3.39) в уравнение (3.38) приводит к нелинейному уравнению типа $F(z) = 0$, которое должно выполняться для любых значений z . Далее, вычисляя эту функцию для M разнесенных точек $z_i = (i-1)L/2(M-1)$, получим систему M нелинейных алгебраических уравнений относительно M неизвестных коэффициентов c_j , которая может быть решена численно с использованием метода итераций Ньютона-Рафсона или гибридного метода Пауелла. (Для достижения необходимой точности число M нужно взять достаточно большим, обычно вполне достаточно взять $M = 100$.) Заметим, что описанный выше метод предполагает, что кинк может двигаться свободно и потери на излучение полностью отсутствуют.

Используя эту технику, Савин и др. [179] нашли целую иерархию состояний двойного кинка, характеризующихся различными расстояниями между составными кинками. Каждое из этих связанных состояний динамически устойчиво при некотором (предпочтительном) значении скорости v_k для данного набора параметров модели. Решение, соответствующее двойному кинку, существует только для достаточно сильного взаимодействия g , так что параметр g должен быть ограничен снизу: $g > g_k$ ($g_0 \approx 0.13$, $g_1 \approx 0.31$, $g_2 \approx 0.5$, и т.д.). Важно заметить, что эти решения существуют только вследствие *дискретности* цепи ФК, в континуальной модели они отсутствуют. Столкновение двух двойных кинков происходит квази-упруго для больших значений g и деструктивно для меньших значений постоянной жесткости, здесь после столкновения двойные кинки распадаются на отдельные 2π -кинки.

Интересно отметить, что хотя такие мультикинковые решения модели ФК не могут быть стационарными, в моделировании Савина и др. [179] было обнаружено связанное состояние двух неподвижных 2π -кинок, связанных через бризер. Таким образом, эти решения можно рассматривать как связанные состояния двух наноптеронов (т.е. кинков, построенных на осциллирующем фоне), когда их осциллирующие асимптотики аннигилируют друг с другом.

Как мы уже упоминали, пока еще нет точного объяснения существования мультикинков, хотя было сделано несколько попыток понять причину эффектов данного типа в квазиконтинуальном приближении [181, 182]. Действительно, если учесть в континуальном приближении производную четвертого порядка, мы получим возмущенное уравнение СГ в нормализованной форме:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \beta \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + \sin u = 0, \quad (3.40)$$

где параметр $\beta = a_s^2/12$ описывает эффекты дискретности.

Уравнение (3.40) учитывает эффекты дискретности через дисперсионный член четвертого порядка и при $\beta = 0$ оно трансформируется в хорошо известное точно интегрируемое уравнение СГ, которое имеет аналитическое решение для изолированного 2π кинка,двигающегося с произвольной скоростью $v < c$. В отличие от этого, Чаппис и Кившарь [182] показали, что уравнение (3.40) для $\beta \neq 0$ обладает классом локализованных решений в форме $2n\pi$ мультикинков,двигающихся с *фиксированными* скоростями.

Следуя Чаппису и Кившарю [182], мы будем искать локализованное решение типа кинка уравнения (3.40), которое движется со скоростью v ($v^2 < c^2$), т. е., мы положим $u(z) = u(x - vt)$. Линеаризуя уравнение (3.40) и беря $u(z) \propto e^{\lambda z}$, мы найдем собственные значения λ в виде

$$\lambda^2 = \frac{1}{2\beta} \left[-(c^2 - v^2) \pm \sqrt{(c^2 - v^2)^2 + 4\beta} \right],$$

так что для $\beta > 0$ всегда существуют два действительных и два чисто мнимых собственных значений. Таким образом, нулевое состояние $u = 0$ является седловой точкой уравнения (3.40), следовательно кинки, являющиеся гомотопическими решениями к $u = 0 \pmod{2\pi}$, могут быть только для изолированных значений скорости v при фиксированном значении параметра β [182].

Для того чтобы найти все решения этого типа, мы в первую очередь фиксируем значение $\beta = 1/12$. Используя численный метод стрельбы, примененный к обыкновенному дифференциальному уравнению для $u(z)$ и использующий хорошо-устойчивый метод Ньютона для нахождения гомотопических/гетероклинических траекторий, можно найти набор кинкоподобных локализованных решений. Первый результат состоит в том, что совсем не существует 2π -кинковых решений. Вместо них существует дискретное семейство 4π -кинков, а именно, существует только четыре таких решения для разных значений v . Первое решение имеет аналитическую форму [181]

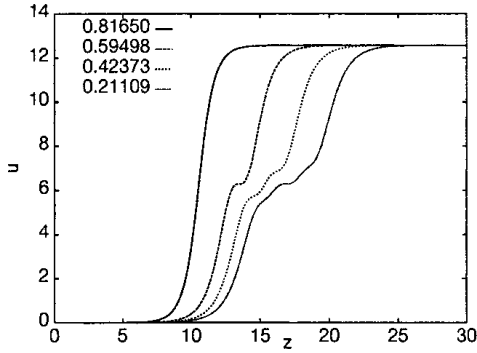


Рис. 3.6. Четыре 4π -кинковых решений СГ уравнения четвертого порядка (3.40) при $\beta = 1/4$. Величины скоростей v/c даны в обозначениях работы [182].

$$u(z) = 8 \tan^{-1} \exp \left[(3\beta)^{1/4} z \right], \quad (3.41)$$

где

$$v^2/c^2 = 1 - 2\sqrt{\beta/3}, \quad (3.42)$$

т.е. мы имеем $v_{4\pi}^{(1)}/c = \sqrt{2/3}$. Другие значения: $v_{4\pi}^{(2)}/c \approx 0.59498$, $v_{4\pi}^{(3)}/c \approx 0.42373$, и $v_{4\pi}^{(4)}/c \approx 0.21109$. Все эти решения представлены на рис. 3.6. В дополнение к 4π кинкам, численные данные показывают наличие значений v , для которых существуют $2n\pi$ кинки для всех $n > 2$. Зависимость (3.42) для таких локализованных решений напоминает численные результаты Пейрара и Крускала [171], представленные на рис. 3.5.

Наконец, отметим, что случай $\beta < 0$ в уравнении (3.40) может также иметь место в обобщенных нелинейных решетках, если учесть взаимодействие следующих соседей, т.е. если учесть так называемые винтовые члены в нелинейных моделях [110]. В этом случае анализ намного проще. Подобно нелокальным СГ уравнениям [183], он приводит к непрерывному относительно v семейству мультикинков. С математической точки зрения, в случае $\beta < 0$ состояние $u = 0$ меняется от точки седлового центра к седловому фокусу, и поэтому строгие вариационные принципы дают семейство устойчивых $2n\pi$ кинков для всех $n > 1$.

3.3 Потенциал подложки общего вида

Стандартная модель ФК (1.1) – (1.5) описывает цепочку частиц, помещенную в строго синусоидальный потенциал подложки. Однако, как было описано ранее в главе 2, реалистические физические модели чаще используют более сложные типы потенциалов подложки, которые хотя и являются периодическими функциями, но могут отличаться от простой синусоидальной формы. Действительно, потенциал подложки в модели ФК является эффективным потенциалом, возникающим вследствие взаимодействия атомов цепи с другими степенями свободы, т.е. с атомами подложки. При этом используется самое простое приближение: (i) атомы подложки образуют простую решетку с одним атомом в элементарной ячейке; (ii) разложение Фурье потенциала взаимодействия аппроксимируется только первой гармоникой. Практически во всех физических ситуациях форма периодического потенциала $V_{\text{sub}}(x)$ отличается от синусоидальной. Например, для атомов адсорбированных поверхностью металла потенциал подложки обычно характеризуется узкими ямами, разделенными плоскими барьерами [184]. Более того, если подложка имеет более сложную элементарную ячейку, то потенциал $V_{\text{sub}}(x)$ тоже будет иметь более сложную форму с несколькими минимумами и максимумами.

3.3.1 Основные свойства

Сначала мы обсудим общий случай, когда потенциал подложки $V_{\text{sub}}(x)$ является периодической функцией с периодом $a_s = 2\pi$ и имеет по крайней мере один минимум при $x \in (0, a_s)$, скажем при $x = x_0$, и один максимум при $x = x_m$. Без потери общности мы можем предположить, что $V_{\text{sub}}(x_0) = 0$ и $V_{\text{sub}}(x_m) \equiv \varepsilon_s = 2$. Как и ранее, мы рассмотрим только соразмерный случай, когда основное состояние цепи имеет только один атом на период потенциала подложки a_s .

Отклонение формы потенциала подложки от синусоидальной меняет параметры как линейных волн (фононов), так и нелинейных мод (кинков). В результате этого в системе могут появиться новые кинковые решения и новые ветви фононов. Несинусоидальность потенциала подложки также резко меняет вид бризерных решений. В начале рассмотрим задачи, связанные с изменением формы потенциала подложки, с общей точки зрения.

Фононные моды в модели ФК характеризуются дисперсионным соотношением $\omega_{\text{ph}}^2(\kappa) = \omega_{\text{min}}^2 + 2g(1 - \cos \kappa)$, где $|\kappa| < \pi$, а минимальная частота ω_{min} , определяемая как $\omega_{\text{min}}^2 = V_{\text{sub}}''(x_0)$, соответствует колебанию изолированного атома вблизи минимума потенциальной энергии. В стандартной модели ФК эта частота

нормализована условием $\omega_{\min} = 1$. В случае более острых ям мы будем иметь $\omega_{\min} > 1$, а для минимумов с более плоским дном – $\omega_{\min} < 1$. Заметим, что в обобщенной модели ФК возможно существование более чем одной фононной ветви, если потенциал $V_{\text{sub}}(x)$ имеет более одного минимума на период (см. далее секцию 3.3.4).

При $g \gg 1$ кинки могут быть описаны в континуальном приближении. Если опустить эффекты дискретности, то обобщенное уравнение СГ будет иметь вид

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - d^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + V'_{\text{sub}}(u) = 0. \quad (3.43)$$

Уравнение (3.43) обладает инвариантностью Лоренца и поэтому всегда имеет стационарное решение $u(x, t) = \phi(y)$, $y = \gamma[x - X(t)]/d$, $\gamma = (1 - v^2/c^2)^{-1/2}$, где координата кинка $X(t) = X_0 + vt$, а его скорость $v = dX/dt$ ($|v| < c$) (напомним, что в используемой системе единиц $c = d$). Уравнение для функции $\phi(y)$

$$\frac{d^2 \phi}{dy^2} = V'_{\text{sub}}(\phi) \quad (3.44)$$

совпадает с уравнением движения некоторой эффективной частицы с координатой ϕ под действием потенциала $U(\phi) = -V_{\text{sub}}(\phi)$. Малоамплитудные периодические колебания этой частицы вблизи минимума потенциала $U(\phi)$ соответствуют линейным волнам, вращение частицы – кноидальным волнам (решеткам кинков), а сепаратрисные траектории – однокинковым решениям с граничными условиями

$$\phi(y) \rightarrow x_0 \pmod{2\pi} \quad \text{и} \quad \frac{d\phi(y)}{dy} \rightarrow 0 \quad \text{при} \quad y \rightarrow \pm\infty. \quad (3.45)$$

Интегрирование уравнения (3.44) с учетом условия (3.45) позволяет получить уравнение

$$\left(\frac{d\phi}{dy} \right)^2 = 2V_{\text{sub}}(\phi), \quad (3.46)$$

из которого легко найти форму кинка в неявном виде

$$y = \mp \int_{x_m}^{\phi(y)} \frac{d\phi}{\sqrt{2V_{\text{sub}}(\phi)}}. \quad (3.47)$$

Здесь верхний знак перед интегралом соответствует кинковому решению (локальному сжатию цепи), в то время как нижний знак – антикинковому решению, а величина x_m – максимуму потенциала подложки. Так как кинковое (антикинковое) решение связывает два ближайших соседних минимума потенциала подложки, например x_0 и $x_0 + 2\pi$, то может существовать несколько типов кинков, если потенциал имеет более двух минимумов на один период (см. далее секцию 3.3.4).

Стационарный кинк можно охарактеризовать асимптотиками его хвостов на бесконечности. Если $u(x) \rightarrow x_0$ для $x \rightarrow +\infty$ или $x \rightarrow -\infty$, тогда $|u_k(x) - x_0| \propto \exp(-\omega_{\min}|x|/d)$, для $|x| \rightarrow \infty$. Хвосты кинков определяют характер взаимодействия между кинками. Поэтому сила кинк-кинкового взаимодействия будет слабее в случае $\omega_{\min} > 1$ (т.е. для потенциала подложки с острыми ямами), чем в случае СГ модели, когда $\omega_{\min} = 1$. "Ядро" кинка задается выражением

$$u_k(x) \approx x_m - \left(\frac{\sigma x}{d} \right) [2V_{\text{sub}}(x_m)]^{1/2} \left(1 - \frac{x^2}{6d_{\text{eff}}^2} \right) \quad (3.48)$$

для $|u_k(x) - x_m| \ll d$, так что эффективная ширина кинка $d_{\text{eff}} = d[-V''_{\text{sub}}(x_m)]^{-1/2}$. Согласно уравнению (3.10), масса кинка (в состоянии покоя) может быть определена как

$$m = \frac{1}{4\pi^2 \sqrt{g}} \int_{x'_0}^{x''_0} d\phi \sqrt{2V_{\text{sub}}(\phi)}, \quad (3.49)$$

где x'_0 и x''_0 задают положения двух соседних последовательных минимумов потенциала подложки. Энергия стационарного кинка $\varepsilon_k = mc^2$, где в наших обозначениях $c = d$. Кинетическая энергия кинка K_k определяется как $K_k = mc^2(\gamma - 1) \approx \frac{1}{2}mv^2$.

В следующем параграфе мы рассмотрим несколько примеров несинусоидального потенциала подложки $V_{\text{sub}}(u)$. Один из них – это так называемый потенциал двойной СГ [32, 185]

$$V_{\text{sub}}^{(DSG)}(x) = -\cos x - s \cos(2x). \quad (3.50)$$

Потенциал (3.50) топологически подобен потенциалу модели СГ для $|s| < 1/4$, но характеризуется более плоскими ямами при $-1/4 < s < 0$ и более острыми при $0 < s < 1/4$. Кроме того, форма потенциала (3.50) имеет двухъямную (DW, от английского double well) структуру для $s < -1/4$ и двухбарьерную (DB, от английского double-barrier) для $s > 1/4$. Мы также хотели бы упомянуть более общий потенциал предложенный Пейраром и Ремуасне [186, 187], который будет анализироваться далее.

3.3.2 Внутренние моды кинка

В отличие от СГ кинка, кинк в дискретной или непрерывной модели ФК с несинусоидальным потенциалом подложки может иметь дополнительные локализованные степени свободы, так называемые "внутренние моды". Для того чтобы понять происхождение таких мод, мы должны линеаризовать уравнение движения (3.43) около кинкового решения, используя подстановку $u(x) = u_k(x) + \Psi(x) e^{i\Omega t}$. Тогда функция $\Psi(x)$ будет удовлетворять линейному уравнению типа Шредингера

$$-d^2 \frac{d^2 \Psi}{dx^2} + W(x) \Psi(x) = \omega^2 \Psi(x), \quad (3.51)$$

где

$$W(x) = \left. \frac{d^2 V_{\text{sub}}(u)}{du^2} \right|_{u=u_k(x)}. \quad (3.52)$$

Уравнения (3.51) и (3.52) всегда имеют континуум решений в виде плоских волн (фононов) с частотами $\Omega > \omega_{\min}$, а также, так называемую голдстоуновскую моду $\Psi(x) = du_k/dx$ с $\Omega = 0$. В дискретной модели ФК последняя мода имеет ненулевое собственное значение ω_{PN} . Дополнительно к этим двум модам, уравнение (3.51) может также иметь одну или несколько собственных мод с дискретными частотами в частотной щели $(0, \omega_{\min})$ или, в зависимости от потенциала подложки, с частотами $\Omega > \omega_{\max}$ (см детали в работе [190]). Такие моды локализованы вблизи центра кинка и поэтому они могут рассматриваться как внутренние колебания формы кинка. Колебания формы могут возбуждаться при столкновениях кинков и при взаимодействиях кинков с примесями или внешними периодическими полями. Поэтому эти моды играют важную роль в динамике кинков.

Внутренние моды кинка появляются в результате деформации потенциала подложки, и следовательно они отсутствуют в точно интегрируемой модели СГ. Это значит, что любое малое возмущение уравнения СГ может создать добавочное собственное значение, которое отщепляется от непрерывного спектра. Аналитический подход для описания рождения внутренних мод уединенных волн (в частности кинков) впервые был предложен Кившарем и др. [191]. Они показали, что малое возмущение определенного знака интегрируемой модели приводит к появлению солитонной внутренней моды, которая ответвляется от спектра непрерывных волн (см. также работы [190], [192]–[194] с более точными результатами).

Следуя Кившарю и др. [191], мы рассмотрим кинки возмущенного уравнения СГ

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \sin u + \epsilon \hat{g}(u) = 0, \quad (3.53)$$

где $\hat{g}(u)$ – оператор, вызывающий возмущение (который описывает деформацию синусоидального потенциала). Считая параметр ϵ малым, мы будем искать кинковое решение $u_k(x)$ уравнения (3.53) в форме ряда Тейлора $u_k(x) = u_k^{(0)}(x) + \epsilon u_k^{(1)}(x) + O(\epsilon^2)$, где $u_k^{(0)}(x) = 4 \tan^{-1} e^x$ – решение невозмущенного уравнения СГ. Пространственно локализованную коррекцию $u_k^{(1)}(x)$ формы кинка можно затем найти в точной форме

$$u_k^{(1)}(x) = \frac{1}{\cosh x} \int_0^x dx' \cosh^2 x' \int_0^{x'} dx'' \frac{\hat{g}(u_k^{(0)})}{\cosh x''}.$$

Для анализа малоамплитудных мод около $u_k(x)$, мы линеаризуем уравнение (3.53), сделав подстановку $u(x, t) = u_k(x) + w(x) e^{i\Omega t} + w^*(x) e^{-i\Omega t}$, где собственное значение Ω и функция $w(x)$ удовлетворяют уравнению

$$\frac{d^2 w}{dx^2} + \left(\frac{2}{\cosh^2 x} - 1 \right) w + \Omega^2 w + \epsilon \hat{f}(x) w = 0, \quad (3.54)$$

где $\hat{f}(x) \equiv u_k^{(1)}(x) \sin(u_k^{(0)}(x)) - \hat{g}'(u_k^{(0)}(x))$ и $\hat{g}' = d\hat{g}/dz$.

Для главного порядка ($\epsilon = 0$), задача на собственные значения (3.54) описывается стандартным уравнением с подпадающим решением потенциалом. Ее общее решение представляется посредством набора собственных функций

$$w(x) = \alpha_{-1} W_{-1}(x) + \int_{-\infty}^{\infty} \alpha(k) W(x, k) dk, \quad (3.55)$$

где функция $W_{-1}(x) = \text{sech } x$ есть собственная мода дискретного спектра, соответствующая собственному значению $\Omega^2 = 0$ (так называемая нейтральная мода), а собственная функция $W(x, k) = e^{ikx} (k + i \tanh x) / (k + i)$ описывает непрерывный спектр волн с бесконечной зоной собственных значений $\Omega^2 = \Omega^2(k) = 1 + k^2$. Мы заметим, что (i) зона волнового непрерывного спектра отделена от собственных значений дискретного спектра

и (ii) собственные функции $W(x, k)$ включают только один экспоненциальный множитель в обоих пределах $x \rightarrow \pm\infty$, т.е. эффективный потенциал в уравнении (3.54) является безотражательным при $\epsilon = 0$. Вследствие последнего условия, конечная точка зоны непрерывного спектра ($k = 0$) принадлежит спектру и предельная (не осциллирующая) функция $W(x, 0) = \tanh x$ не является медленно растущей.

Теперь мы проанализируем возмущенную задачу на собственные значения (3.54) в приближении первого порядка по ϵ , раскладывая функцию $w(x)$ по множеству собственных функций – см. уравнение (3.55). Во-первых, возмущение эффективного потенциала в уравнении (3.54) должно приводить к *деформации* собственных функций и к *сдвигу* собственных значений дискретного спектра. Во-вторых, при выполнении условий (i) и (ii) возмущение может приводить к рождению *добавочного значения* дискретного спектра, которое отделяется от зоны непрерывного спектра.

Для того чтобы найти это новое значение, мы заметим, что в первом порядке по ϵ возмущение может сдвинуть крайнюю частоту $\Omega_{\min}$ фонового спектра, $\Omega_{\min}^2 = 1 + \epsilon \hat{g}'(0)$. Следовательно, для описания рождения нового дискретного состояния, мы предположим что его собственное значение отделяется от крайней частоты $\Omega^2 = \Omega_{\min}^2 - \epsilon^2 \kappa^2$, где κ – параметр, определяющий положение добавочного значения дискретного спектра, $k_0 = i\epsilon\kappa$. Затем мы преобразуем уравнение (3.54) с учетом уравнения (3.55) в следующее интегральное уравнение

$$a(k) = \frac{\epsilon}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk' \frac{K(k, k') a(k')}{k'^2 + \epsilon^2 \kappa^2}, \quad (3.56)$$

где $a(k) = \alpha(k) (k^2 + \epsilon^2 \kappa^2)$, а интегральное ядро $K(k, k')$ определяется как

$$K(k, k') = \int_{-\infty}^{\infty} W^*(x, k) [\hat{f}(x) + \hat{g}'(0)] W(x, k') dx,$$

где $\hat{f}(x)$ и $\hat{g}(x)$ являются в общем случае операторами. Для получения уравнения (3.56), мы пренебрегли несингулярным вкладом дискретного спектра и использовали условие ортогональности

$$\int_{-\infty}^{\infty} W^*(x, k') W(x, k) dx = 2\pi \delta(k' - k).$$

Так как новое собственное значение отделяется от зоны непрерывного спектра при $k = 0$ и $\Omega = \Omega_{\min}$, то мы можем сконструировать асимптотическое решение для уравнения (3.56) при малых k , вычисляя сингулярный вклад интеграла $a(k) = \text{sign}(\epsilon) (2|\kappa|)^{-1} K(k, 0) a(0)$. В результате мы определим параметр κ из условия самосогласования

$$|\kappa| = \frac{1}{2} \text{sign}(\epsilon) \int_{-\infty}^{\infty} \tanh x [\hat{f}(x) + \hat{g}'(0)] \tanh x dx. \quad (3.57)$$

Следовательно, новое собственное значение $k_0 = i\epsilon\kappa$ дискретного спектра появляется, когда правая часть уравнения (3.57) становится положительной. Из уравнения (3.55) следует, что соответствующая собственная функция является экспоненциально локализованной, т.е. $w(x) \rightarrow \pm(\pi/\epsilon\kappa) a(0) \exp(\mp\kappa x)$ при $x \rightarrow \pm\infty$. Этот результат подтверждает наблюдение, что беспороговое рождение внутренней моды солитона из непрерывного спектра становится возможным только в тех моделях, где уединенные волны создают безотражательные потенциалы в соответствующей задаче на собственные значения. Это свойство является общим для многих солитонных нелинейных моделей.

В качестве примера применения этого общего результата мы рассмотрим уравнение двойной СГ, которое получается из уравнения (3.53) при $\hat{g}(u) = \sin(2u)$ [см. также уравнение (3.50)]. Как было показано численно Кэмпбеллом и др. [195], внутренняя мода у кинка существует только при $\epsilon > 0$. Применяя предложенный выше асимптотический метод, мы получим приближение первого порядка формы кинка

$$u_k^{(1)}(x) = 2 \left(\frac{x}{\cosh x} - \frac{\sinh x}{\cosh^2 x} \right),$$

и затем, используя уравнение (3.57), вычислим дискретное собственное значение с $k_0 = i(8/3)\epsilon$. Следовательно, внутренняя мода кинка возможна только для $\epsilon > 0$ и ее частота определяется выражением

$$\Omega^2 = 1 + 2\epsilon - \frac{64}{9}\epsilon^2 + O(\epsilon^3). \quad (3.58)$$

Наконец, напомним, что собственные значения, вкрапленные в непрерывный спектр, могут быть проанализированы посредством техники функций Еванса. Эта техника, применительно к случаю дискретных систем, была недавно развита Бомворфом и др. [194].

Браун и др. [190] проанализировали численно влияние дискретности и изменения формы потенциала подложки на существование и свойства внутренних мод кинка. Они показали, в частности, что кинковые

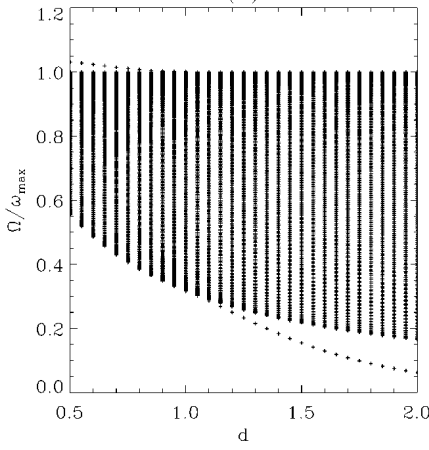


Рис. 3.7. Пример спектра малоамплитудных возбуждений около кинка в обобщенной модели ФК как функция ширины кинка d для значения параметра $s = -0.2$, определяющего форму потенциала подложки (сильная дискретность соответствует малым значениям d). Частоты были поделены на $\omega_{\max}$ для того, чтобы более четко показать существование моды выше фононной зоны для малых значений d [190].

внутренние моды могут появляться не только ниже, но также и выше зоны фононного спектра (в последнем случае локализованная мода описывает сдвинутые по фазе колебания формы кинка). Рис. 3.7 показывает пример полученного численно линейного спектра возбуждений кинка в обобщенной модели ФК с потенциалом (3.59) при $s = -0.2$. Для получения этих результатов, Браун и др. [190] нашли вначале соответствующую кинку стационарную конфигурацию частиц, минимизируя энергию цепи с соответствующими граничными условиями. После того как все равновесные положения частиц цепи стали известны, спектр малоамплитудных колебаний около этого состояния можно найти, решая систему линейных уравнений. Ее собственные значения дают частоты малоамплитудных колебаний около кинка, а соответствующие собственные вектора описывают пространственный профиль каждой моды.

Рисунок 3.7 показывает зависимость спектра от различных значений ширины кинка d . Кроме изменения фононной зоны, этот рисунок четко показывает рост частоты ПН моды с ростом дискретности. В дополнение к этому, рис. 3.7 показывает как дискретность приводит к образованию нового типа высокочастотных локализованных мод при $s < 0$. Дискретность также приводит к более тонким эффектам, которые не видны на этом рисунке, их обсуждение дано в работе Брауна и др. [190].

Более того, для синусоидального потенциала подложки, когда уравнение описывает классическую модель ФК, в противоположность континуальному пределу, у кинка могут существовать внутренние моды для узкой области значений параметра дискретности d [190].

3.3.3 Несинусоидальный потенциал подложки

Важный тип потенциала подложки, описывающий многие реалистические ситуации, например динамику атомов адсорбированных на поверхности кристалла, был предложен Пейраром и Ремуасне [186],

$$V_{\text{sub}}^{(NS)}(x) = \frac{(1+s)^2(1-\cos x)}{(1+s^2-2s\cos x)}, \quad |s| < 1. \quad (3.59)$$

Параметр s (в оригинальной работе авторы использовали параметр $r = -s$) характеризует различные формы потенциала подложки, изменяющиеся от случая плоских ям до случая плоских барьеров (см. рис. 3.8).

Частотный спектр фононов в модели (3.59) характеризуется минимальной частотой $\omega_{\min} = (1+s)/(1-s)$, кинки — характеристической шириной $d_{\text{eff}} = \omega_{\min}d$ и массой, определенной следующим выражением:

$$m = m^{(SG)} \left(\frac{\omega_{\min}}{\omega_*} \right) \begin{cases} \tanh^{-1} \omega_*, & \text{if } s < 0, \\ \tan^{-1} \omega_*, & \text{if } s > 0, \end{cases} \quad (3.60)$$

где $\omega_* \equiv |\omega_{\min}^2 - 1|^{1/2}$. Форма кинка в этой модели была найдена численно Пейраром и Ремуасне [186]; кинк узок в случае плоских минимумов ($s < 0$) и широк в противоположном случае узких ям ($s > 0$). Масса кинка m стремится к нулю при $s \rightarrow -1$, т. е. кинки легче создать в системе с плоскодонным потенциалом.

При рассмотрении свойств дискретной цепи с потенциалом подложки (3.59) следует ожидать, что изменение формы потенциала должно приводить к изменению ПН барьера. Это было подтверждено при помощи численного моделирования Пейраром и Ремуасне [186]. Их результаты показаны на рис. 3.9. Барьер ПН E_{PN} для этой модели аналитически был оценен бу Ишибаши и Сузуки [151]. Они использовали форму кинка, полученную из континуального приближения, для вычисления энергии в дискретном случае. Их результат задается следующими выражениями [151],

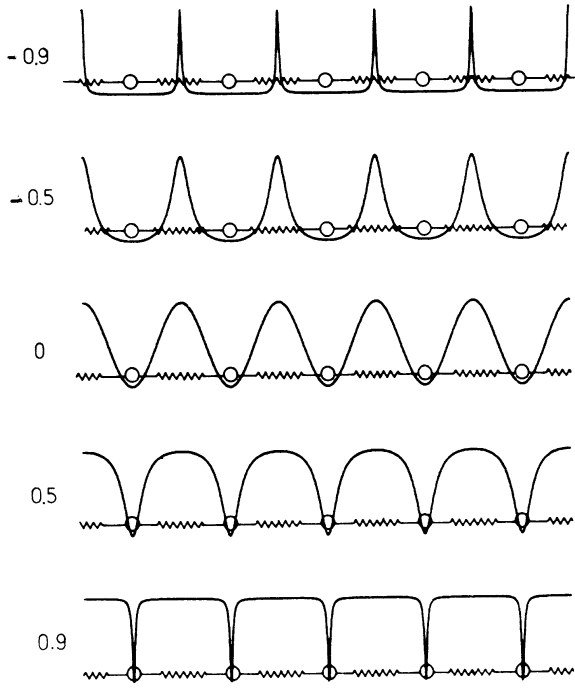


Рис. 3.8. Цепочка слабо связанных частиц в периодическом потенциале подложки (3.59). Показаны различные типы потенциала для приведенных слева значений s [186].

$$\frac{E_{PN}}{E_{PN}^{(SG)}} \propto \begin{cases} \exp\left(\frac{2\pi^2\sqrt{g|s|}}{1+\sqrt{|s|}}\right), & \text{for } s < 0, \\ \left|\cos\left(\frac{2\pi^2\sqrt{gs}}{1+s}\right)\right| \exp\left(\frac{2\pi^2 s\sqrt{g}}{1+s}\right), & \text{for } s > 0. \end{cases} \quad (3.61)$$

Для $s > 0$ (узкие ямы) амплитуда ПН потенциала E_{PN} зависит немонотонно от константы жесткости g . Мы должны здесь упомянуть, что такая немонотонная зависимость энергии ПН от константы взаимодействия была обнаружена раньше для потенциала подложки, являющегося периодической последовательностью соединенных кусков парабол [147], [196]–[199]. В стандартной модели ФК с синусоидальным потенциалом потенциальная энергия $V_{PN}(X)$ имеет минимум при $X = 0$, т.е. для структуры атомов с двумя центральными частицами в одной и той же потенциальной яме [см. рис. 3.10(a)], а максимум – при $X = \pi$ для конфигурации атомов, показанной на рис. 3.10(c), когда один из атомов находится на вершине одного из барьеров потенциала подложки. Назовем эту ситуацию N рельефом (от английского слова normal). Случай $s \leq 0$ для несинусоидальной подложки (3.59) всегда соответствует N-рельефу. Однако случай $s > 0$ является более сложным. Кроме N-рельефа, здесь может существовать так называемый I (т.е. inverse) рельеф, когда конфигурация, показанная на рис. 3.10(a), уже соответствует максимуму ПН потенциала, а конфигурация, изображенная на рис. 3.10(c), – минимуму функции $V_{PN}(X)$. Такая ситуация имеет место для определенных значений параметра g , и случаи N- и I-рельефов чередуются между собой при изменении g . В дополнение к этому, между областями N- и I-рельефов существуют промежуточные области, где обе конфигурации, показанные на рис. 3.10(a) и 3.10(c), соответствуют двум максимумам функции $V_{PN}(x)$, а минимум реализуется для некоторой промежуточной конфигурации [такой, как показано на рис. 3.10(b)] с $0 < X < \pi$. В результате этого, в промежуточных областях зависимость $E_{PN}(g)$ имеет резко выраженные локальные минимумы (см. рис. 3.9). Интересно отметить, что для потенциала подложки, состоящего из последовательности парабол, величина E_{PN} в промежуточных областях обращается в ноль [198, 199]. В пределе $g \rightarrow 0$ эти свойства ПН потенциала исчезают и ПН потенциал стремится к функции $V_{\text{sub}}(X)$.

На качественном уровне динамика модели ФК с несинусоидальным потенциалом подобна описанной ранее динамике стандартной модели ФК. Движение ФК кинка всегда сопровождается излучением фононов, которое обусловлено дискретностью модели [186]. Коэффициент эффективного трения η , обусловленного излучением, возрастает с изменением параметра $|s|$, если оно приводит к увеличению барьера ПН E_{PN} . Столкновение кинков с фононами и с другими кинками происходит почти упруго, но величина эффективного сдвига фаз зависит от значения параметра s .

Однако модель ФК с несинусоидальным потенциалом подложки, по сравнению со стандартной ФК моделью, обладает п крайней мере *двумя новыми свойствами* динамики кинков. Первым из них является существование долгоживущих мало-амплитудных бризеров в определенном интервале значений параметра s , а именно, бризеры (описываемые приближенно эффективным нелинейным уравнением Шредингера для медленно изменяющегося волнового пакета – см. далее) существуют только для значений s в интервале $s_0 < s < 1$, где $s_0 = \sqrt{24} - 5 \approx -0.1$.

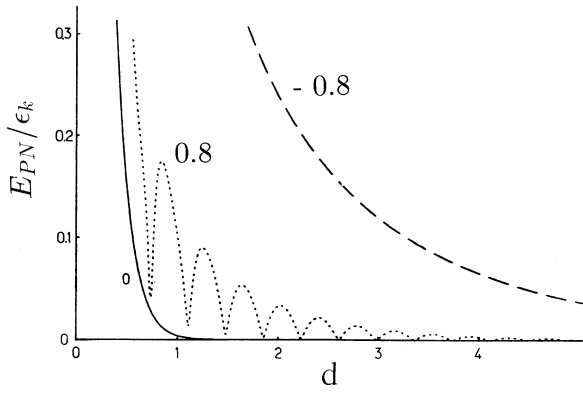


Рис. 3.9. Зависимость величины ПН потенциального барьера E_{PN} , данной в единицах энергии покоя кинка, от ширины кинка d для трех значений параметра $s = -0.8$, $s = 0$ и $s = +0.8$ [186].

Вторым новым свойством модели является существование у кинков внутренних мод при $s > 0$, как это было описано выше. Эти два главных свойства нелинейных возбуждений в обобщенной модели ФК существенно изменяют сценарий кинк-антикиновых столкновений.

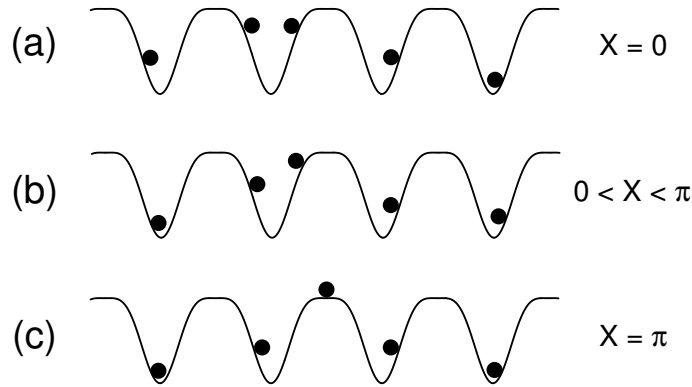


Рис. 3.10. Структура кинка для потенциала подложки с узкими ямами.

Для несинусоидального потенциала с $s < 0$ существует критическое значение кинетической энергии кинка K_{cr} такое, что быстрые кинк и антикинк с начальной кинетической энергией, большей K_{cr} , проходят друг сквозь друга почти без изменения своей энергии. В противном случае столкновение будет неупругим и, в общем случае, кинк и антикинк не смогут уйти друг от друга из-за (притягивающего) потенциала их взаимодействия, так как часть их энергии теряется на излучение. Следовательно, кинк и антикинк могут образовать связанное состояние, являющееся высоко-амплитудным (ВА) бризером (при потери своей энергии он превращается со временем в мало-амплитудный (МА) бризер). Однако дальнейшая эволюция такого связанного состояния различна для случаев $s > s_0$ и $s < s_0$, где $s_0 = \sqrt{24} - 5 \approx -0.1$. В первом случае, ВА бризер медленно (по степенному закону) трансформируется в МА бризер. В другом случае, т.е. для $-1 < s < s_0$, когда в системе не могут существовать МА бризеры, ВА бризер затухает более быстро, излучая два волновых пакета. В этом последнем случае, кинк-антикиновое столкновение является чисто деструктивным.

В случае, когда потенциал подложки имеет узкие ямы ($s > 0$), при кинк-антикиновом столкновении появляется новое явление, обусловленное существованием у кинка внутренних мод. А именно, конечный результат кинк-антикинового столкновения при энергии ниже порогового значения K_{cr} зависит от начального значения относительной скорости кинков. Столкновение может приводить либо к образованию бризера, который потом медленно затухает, либо быть резонансным (недеструктивным), когда кинки не аннигилируют. Резонансное упругое взаимодействие между кинком и антикином связано с резонансным обменом энергии между трансляционными и внутренними модами кинка. Впервые такой тип резонансов был изучен Кэмпбэллом и др. [189] (см. также работу Аниноса и др. [200] и приведенные там ссылки) для модели ϕ^4 и позже для потенциала (3.59). Они обнаружили, что области значений скорости, при которых происходит образование затухающего связанного состояния кинков (так называемые "окна" резонансов скорости), чередуются с областями, где происходит почти упругое прохождение кинков. Численное моделирование показало, что если начальное значение относительной скорости кинка взято из резонансного "окна", то кинк и антикинк связываются сразу после первого столкновения, затем они начинают колебаться, однако после нескольких колебаний уходят на бесконечность. Предложенное Кэмпбэллом и др. [189] объяснение базируется на так называемом резонансном механизме обмена энергии. Действительно, в этих обоих случаях кинки имеют внутренние моды (колебания формы), которые возбуждаются

сразу после первого столкновения, если относительная скорость кинка не является достаточно большой. Когда эти колебания возбуждаются, то они забирают часть кинетической энергии трансляционного движения кинков. Кинки не могут разойтись и начинают двигаться обратно в силу взаимного притяжения, так они сталкиваются снова и снова. Энергия, сохраненная в модах колебаний формы кинков, может быть теперь использована, если выполнены определенные резонансные условия

$$\omega_B T_{12} \approx 2n\pi + \delta, \quad (3.62)$$

где ω_B – частота колебаний формы кинка, T_{12} – время между первым и вторым столкновением кинков, а δ – фазовый сдвиг. Целое число n играет роль числа резонансов и определяет последовательность резонансных скоростей для расхождения кинков, которая лежит ниже критического значения относительной скорости, при которой становится возможно связывание кинков. В реальности, полное число резонансов (т.е. окон) ограничивается излучением фононов. Предложенное Кэмпбэллом и др. [189] феноменологическое объяснение резонансных эффектов аккуратно описывает резонансные структуры столкновения кинков, наблюдаемые при прямом численном моделировании. Существование таких резонансов было показано для нескольких нелинейных моделей, включая модели двойной СГ и ϕ^4 .

Наконец отметим, что данные свойства модели ФК с несинусоидальным потенциалом подложки являются более общими. Например, аналогичная нелинейная динамика наблюдается и для модели двойной СГ [195] при $|s| < 1/4$. Здесь ВА бризеры могут существовать при $s > -1/16$, а внутренние моды кинка — при $s > 0$.

Для завершения этого раздела укажем, что существуют некоторые экзотические формы потенциала подложки $V_{\text{sub}}(x)$, при которых отсутствует ПН потенциальный рельеф, т.е. $E_{PN} = 0$. Систематическую процедуру получения таких экзотических случаев предложили Спейт и Ворд [202] (см. также ссылку [203]). В частности, как мы упоминали ранее, такой эффект возможен у потенциала, сшитого из последовательности кусков парабол, но только для определенных значений параметров модели. Другой пример был дан Баком [204], производная этого потенциала имеет вид

$$V'_{\text{sub}}(x) = 4 \tan^{-1} \left(\frac{\lambda \sin x}{1 - \lambda \cos x} \right), \quad (3.63)$$

где $\lambda = \tanh^2(a_s/d)$. Для потенциала (3.63) *дискретное* уравнение движения имеет точное кинковое решение, совпадающее с СГ кинком, $u_n(t) = 4 \tan^{-1} \exp[-(na_s - X)/d]$. Этот кинк может свободно двигаться вдоль дискретной цепи и его энергия не зависит от его координаты X . Тем не менее, эта модель, в отличие от уравнения СГ, остается неинтегрируемой, т.е. она не имеет многосолитонных решений.

3.3.4 Многоямный потенциал

Далее мы рассмотрим модель ФК с потенциалом подложки, который имеет более одного абсолютного минимума на периоде $a_s = 2\pi$. Из формы такого потенциала следует, что в цепи будет существовать несколько типов кинков и несколько ветвей фононного спектра. В качестве типичного примера мы рассмотрим двухъямный (DW) потенциал, предложенный Ремуасе и Пейраром [187] (см. рис. 3.11)

$$V_{\text{sub}}(x) = \frac{(1-s)^4 [1 - \cos(2x)]}{(1+s^2 + 2s \sin x)^2}, \quad (3.64)$$

где $0 \leq s \leq +1$. Этот потенциал имеет два различных минимума, один при $x_{01} = 0$, другой при $x_{02} = \pi$, с одинаковым уровнем энергии $V_{\text{sub}}(x_{01}) = V_{\text{sub}}(x_{02}) = 0$. Минимумы разделены двумя барьерами с максимумами при x_{m1} и x_{m2} , где первый максимум зависит от значения параметра s :

$$V_{\text{sub}}(x_{m1}) = 2 \left(\frac{1-s}{1+s} \right)^4, \quad (3.65)$$

а второй барьер имеет фиксированную высоту $V_{\text{sub}}(x_{m2}) = 2$.

Модель ФК с двухъямным потенциалом подложки имеет два основных состояния (см. рис. 3.12). В так называемом “левом основном состоянии” (LGS, от английского left ground state), показанном на рис. 3.12(a), все атомы цепи занимают левый минимум потенциала, $x_n = x_{01} + 2\pi n$ ($n = 0, \pm 1, \dots$), а в так называемом “правом основном состоянии” (RGS, от right ground state), показанном на рис. 3.12(b), атомы занимают только правый минимум, т.е. $x_n = x_{02} + 2\pi n$. Оба основных состояния характеризуются фононным спектром с $\omega_{\min} = 2(1-s)^2/(1+s^2)$. Стандартный 2π -кинк, который связывает два эквивалентных основных состояния, например LGS и LGS -2π , теперь расщепляется на два отдельных подкинка. Один подкинк связывает состояния LGS и RGS [см. рис. 3.12(c)] и называется *большим кинком*, (LK) так как он преодолевает наибольший барьер. Другой подкинк, *малый кинк* (SK), связывающий состояния RGS и LGS -2π , преодолевает меньший энергетический

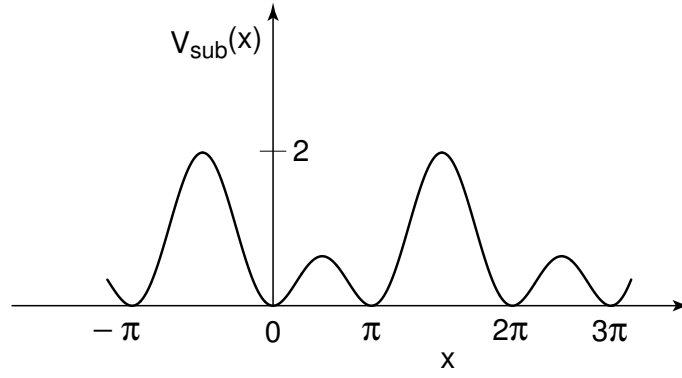


Рис. 3.11. Схематическое представление двухъямного потенциала подложки (3.64).

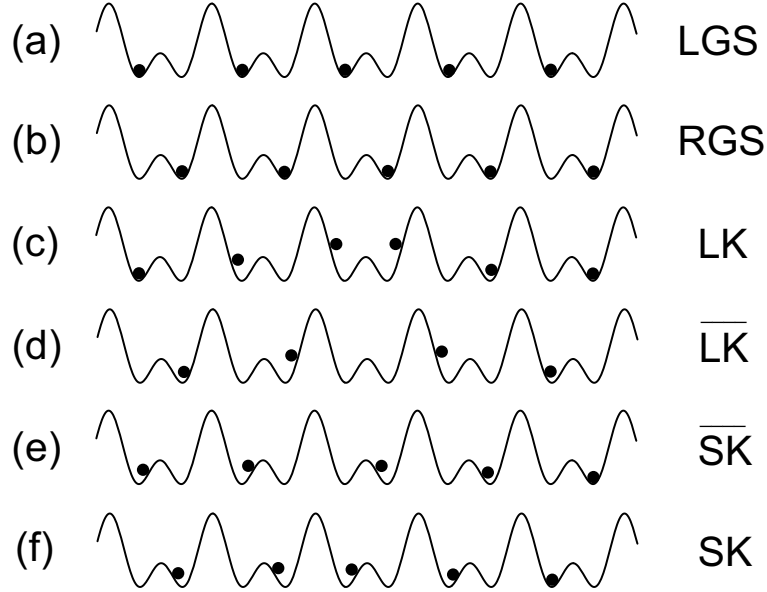


Рис. 3.12. Структура двух типов основного состояния и двух типов кинков в модели ФК с двухъямным потенциалом подложки: (a) "левое" и (b) "правое" основные состояния, (c) большой кинк, (d) большой антикинк, (e) малый антикинк, (f) малый кинк.

барьер [см. рис. 3.12(f)]. Аналогично, в системе можно определить большой ($\overline{LK}$) и малый ($\overline{SK}$) антикинки, – см. рис. 3.12(d) и 3.12(e).

Ясно, что одиночные LK и SK кинки являются независимыми топологическими возбуждениями цепи. Они имеют такие же свойства, как кинки в стандартной СГ модели, однако их параметры отличаются от соответствующих параметров СГ кинка (см. работу [187]). Например, массы этих кинков совпадают при $s = 0$ и одновременно исчезают при $s \rightarrow +1$, но в общем случае они различны, в частности $m_{SK} < m_{LK}$. Кроме того, SK кинк имеет внутреннюю моду, а LK нет. Все это приводит к отличным динамическим эффектам при столкновении SK и LK кинков.

В стандартной модели ФК возможна любая произвольная последовательность кинков и антикинков. Однако в двухъямной модели некоторые комбинации кинков топологически невозможны. Например, в периодической последовательности, кинки SK и LK должны чередоваться, так как паре кинков LK+SK соответствует один "дополнительный" атом цепи. Фактически двухъямная модель допускает только *четыре типа* комбинаций кинков и антикинков: SK+LK, $\overline{SK}+\overline{LK}$, LK+ $\overline{LK}$ и SK+ $\overline{SK}$. Следовательно, в двухъямной модели столкновения возможны только между этими кинками.

Столкновение кинков SK+LK (или $\overline{SK}+\overline{LK}$). Как обычно, два кинка с одинаковыми топологическими зарядами отталкиваются друг от друга, и в данном случае два этих различных кинка топологически не могут пройти сквозь друг друга. Следовательно, столкновение кинков должно приводить к их отражению, которое будет почти упругим при $g \gg 1$ – см. ссылку [187].

LK+LK столкновение. Численное моделирование [187] показало, что кинк и антикинк этого типа проходят сквозь друг друга, трансформируясь, в соответствии с топологией модели, в пару $\overline{\text{SK}}+\text{SK}$. Такой эффект преобразования кинков был проанализирован ранее Маки и Кумером [205] и Шифманом и Кумером [206] в рамках уравнения ДСГ. Согласно закону сохранения энергии, разность энергии покоящихся кинков $\Delta\epsilon = 2(m_{LK} - m_{SK})c^2 > 0$ переходит в кинетическую энергию малых кинков. Это выполняется с высокой точностью, даже несмотря на излучение фононов. Однако при сильной дискретности, когда $g \sim 1$, избыток энергии $\Delta\epsilon$ идет на излучение, что приводит к образованию затухающей кинк-антикинковой пары, переходящей в бризер.

SK+SK столкновение. Если начальная кинетическая энергия K_{in} малых кинков достаточно велика, а именно $K_{\text{in}} > 2(m_{LK} - m_{SK})c^2$, то они могут пройти сквозь друг друга, преобразуясь в более медленно движущуюся пару $\overline{\text{LK}}+\text{LK}$. В противном случае, малые кинки ведут себя подобно кинкам модели ϕ^4 , т.е. они могут связаться в бризерное состояние, если их начальная скорость не превышает некоторого критического значения.

Кэмпбэлл и др. [195] провели детальное исследование столкновения кинков в модели ДСГ (3.50), потенциал которой тоже имеет двухъямную форму при $s < -1/4$. В отличие от рассмотренной выше модели с потенциалом (3.64), подкинки в ДСГ цепи имеют разные амплитуды: $\Delta u_{SK} < \Delta u_{LK}$, где $\Delta u = |u_k(-\infty) - u_k(+\infty)|$. Кинк SK исчезает при обнулении малого барьера, т.е. при $s \rightarrow -1/4$. Кроме того, SK кинк в модели ДСГ обладают внутренней модой. Поэтому, столкновение $\text{SK}+\overline{\text{SK}}$ при малых кинетических энергиях проходит с резонансами, связанными с обменом энергии между трансляционными и внутренними модами кинков подобно случаю, описанному в предыдущем параграфе [189, 195, 201].

Модель с потенциалом подложки более общей формы была предложена для теории солитонов в цепях водородных связей, где топологические солитоны описывают различные типы дефектов этой системы [122],

$$V_{\alpha,\beta}(x) \propto \left[\frac{\cos x - \alpha}{1 - \beta(\cos x - \alpha)} \right]^2. \quad (3.66)$$

Здесь параметр α ($|\alpha| < 1$) описывает относительную ширину двух барьеров и контролирует расстояние между соседними минимумами потенциала подложки. Второй параметр β описывает относительную высоту барьеров. Потенциал (3.66) имеет синусоидальную форму при $\alpha = \beta = 0$ и сводится к потенциалу ДСГ при $\beta = 0$. В цепи с потенциалом (3.66) масса "малого" кинка может быть больше массы "большого" кинка.

В описанных выше результатах обсуждался только случай симметричного потенциала подложки. Однако, в общем случае потенциал подложки может иметь ямы с разной кривизной. Вследствие этого в такой модели может существовать более одной ветви фононного спектра. Например, для асимметричного двухъямного (ADW) потенциала предложенного Ремуасне и Пейраром [187] (см. рис. 3.13),

$$V_{\text{sub}}(x) = \frac{(1-s^2)^2[1 - \cos(2x)]}{(1+s^2+2s\cos x)^2}, \quad (3.67)$$

где $0 \leq s \leq 1$, левое основное состояние (LGS) имеет минимальную фононную частоту (границу щели спектра) $\omega_{\text{min}}^{(L)} = (1-s)/(1+s) < 1$, а правое основное состояние (RGS) характеризуется щелью $\omega_{\text{min}}^{(R)} = (1+s)/(1-s) > 1$. В этой системе существует два подкинка, "левый подкинк" (LK), связывающий состояния LGS и RGS, и обратный ему "правый подкинк" (RK) (эти кинки можно получить один из другого при помощи зеркального отображения). Форма кинка уже не будет симметричной, так как его хвосты лежат в ямах с разной кривизной. Например, LK имеет более протяженный левый хвост,

$$u_k(x \rightarrow -\infty) \propto -\exp\left(-\omega_{\text{min}}^{(L)}|x|/d\right),$$

и более резко затухающий правый хвост,

$$u_k(x \rightarrow +\infty) \propto -\pi + \exp\left(-\omega_{\text{min}}^{(R)}x/d\right).$$

Оба кинка имеют одинаковую массу

$$m = m^{(SG)} \frac{(1-s^2)}{4s} \ln\left(\frac{1+s}{1-s}\right), \quad (3.68)$$

которая меняется от значения $\frac{1}{2}m^{(SG)}$ при $s = 0$ до нуля при $s = 1$.

Кинк в модели ФК с асимметричным двухъямным потенциалом (3.67) обладает внутренней модой с частотой ω_B . Ремуасне и Пейрар [187] обнаружили интересное явление: для $0 < s < 0.4$ величина частоты ω_B лежит между частотами $\omega_{\text{min}}^{(L)}$ и $\omega_{\text{min}}^{(R)}$. Поэтому, когда возбуждается внутренняя мода кинка (например, при столкновении кинков), она быстро затухает из-за излучения фононов около левого основного состояния в направлении

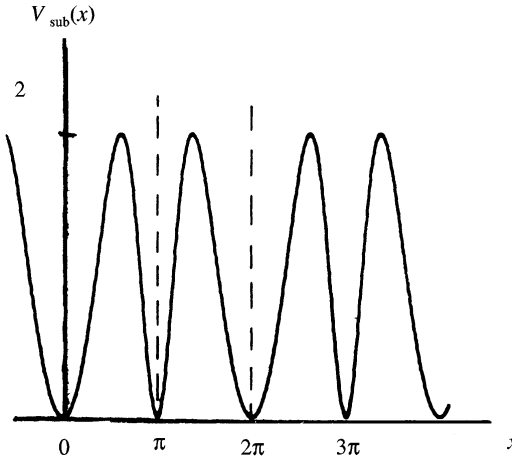


Рис. 3.13. Схематическое представление асимметричного потенциала подложки (3.67).

пологого хвоста кинка. В результате этого, резонансные структуры можно наблюдать только для столкновений $RK + \bar{R}\bar{K}$ и $\bar{L}\bar{K} + LK$, когда кинк и антикинк сталкиваются своими пологими хвостами ("мягкое" столкновение). При этом вся цепочка вне зоны столкновения остается в правом основном состоянии, которое характеризуется фоновой частотой $\omega \geq \omega_{\min}^{(R)} > \omega_B$. Численное моделирование, проведенное Ремуасне и Пейраром [187], показало существование окон отражающих значений скоростей для столкновения этих типов кинков.

Ясно, что каждое из основных состояний (левое или правое) может допускать существование долгоживущих бризерных мод. Ремуасне и Пейрар [187] показали, что правое основное состояние (узкие ямы) всегда допускает существование малоамплитудных бризеров, а левое основное состояние (широкие ямы) допускает существование высокоамплитудных бризеров при $0 < s < s_*$, где $s_* = 2 - \sqrt{3} \approx 0.268$. Поэтому, при $s_* < s < 1$ высокоамплитудный бризер не может быть возбужден в результате жесткого кинк-антикинкового столкновения (т.е., при столкновении $LK + \bar{L}\bar{K}$ или $\bar{R}\bar{K} + RK$, когда кинки сталкиваются со стороны своих коротких хвостов) и кинки сразу разрушаются, излучая фононы. Другой случай столкновения кинков подобен стандартной модели СГ-типа, где столкновения могут трактоваться как взаимодействие эффективных квазичастиц. Из-за асимметрии формы кинка, кинк и антикинк могут сталкиваться либо со стороны их длинных хвостов ("мягкое" столкновение), когда цепочка вне зоны столкновения находится в правом основном состоянии, либо со стороны их коротких хвостов (так называемое "жесткое" столкновение). Мягкие столкновения являются почти полностью упругими, в то время как жесткие столкновения происходят не упруго и сопровождаются сильным излучением [187].

3.3.5 Многобарьерный потенциал

В некоторых приложениях модели ФК (см. главу 2) потенциал подложки имеет сложную структуру с дополнительными локальными минимумами, т.е. двухбарьерную (DB) структуру, показанную на рис. 3.14. В этом случае, система может находиться в "метастабильном основном состоянии" (MGS), когда все атомы цепи занимают локальный минимум потенциала подложки. Здесь, подобно рассмотренной выше двухъямной модели, 2π -кинк расщепляется и создает два подкинка, связывающих состояния GS-MGS и MGS-(GS- 2π). Однако в отличие от двухъямного потенциала, здесь атомы в области между подкинками находятся в метастабильном (возбужденном) состоянии (см. рис. 3.14). Это приводит к эффективному притяжению между двумя подкинками, так как энергия 2π -кинка возрастает с увеличением расстояния между подкинками, т.е. с увеличением числа атомов, занимающих метастабильное состояние. В результате конкуренции этого притяжения и обычного отталкивания подкинков одного и того же топологического заряда существует равновесное межкинковое расстояние R_0 , которое соответствует минимуму энергии 2π -кинка. Таким образом, двухбарьерный кинк можно рассматривать как "молекулу" (2π -кинк), состоящую из двух "атомов" (подкинков или π -кинков), связанных вместе некоторым потенциалом взаимодействия $U_{DB}(R)$, который имеет минимум при $R = R_0$. Ясно, что двухбарьерный кинк должен всегда обладать внутренней модой с частотой ω_B , которая в этом случае имеет простой физический смысл: она соответствует относительным колебаниям двух "атомов" внутри "молекулы".

В качестве примера рассмотрим один из наиболее часто встречающихся потенциалов подложки – потенциал ДСГ (3.50), который имеет двухбарьерную структуру при $s > 1/4$. После введения нового параметра r , определяемого из уравнения $s = (\frac{1}{2} \sinh r)^2$, где $r > \ln(1 + \sqrt{2}) \approx 0.881$, ДСГ потенциал можно представить в виде

$$V_r(x) = \frac{\sinh^2 r}{\cosh^4 r} \{4(1 - \cos x) + \sinh^2 r [1 - \cos(2x)]\}. \quad (3.69)$$

Потенциал (3.69) на одном периоде $a_s = 2\pi$ имеет минимум при $x_0 = 0$, два максимума при $x_m = \pi \pm \cos^{-1}(\cosh^2 r)$, $V_r(x_m) = 2$, и относительный минимум при $x_b = \pi$, $V_r(x_b) = 8 \sinh^2 r / \cosh^4 r$.



Рис. 3.14. Кинк в модели ФК с двухбарьерным потенциалом подложки.

В континуальном приближении, когда $g \gg 1$, стационарный двухбарьерный кинк (антикинк) имеет простую форму

$$u^{(DB)}(x) = \mp 2 \tan^{-1} \left(\frac{\sinh y}{\cosh r} \right), \quad (3.70)$$

где

$$y = 2(x - X)/d. \quad (3.71)$$

Масса кинка определяется как

$$m^{(DB)}(r) = m^{(SG)} \frac{\sinh r}{\cosh r} \left[1 + \frac{2r}{\sinh(2r)} \right] > m^{(SG)}. \quad (3.72)$$

Интересно отметить, что стационарный кинк (3.70), (3.71) уравнения двойной СГ может быть представлен как сумма двух одиночных кинков СГ модели [195, 207],

$$u^{(DB)}(x) = \mp \left[u_\pi(\tilde{R} + y) - u_\pi(\tilde{R} - y) \right], \quad (3.73)$$

где $u_\pi(y) = 2 \tan^{-1} \exp(y)$, $\tilde{R} = r$, а y определяется уравнением (3.71). Таким образом, параметр X может быть рассмотрен как координата центра массы двух кинков, а параметр $R = \tilde{R}d$ – как расстояние между двумя подкинками ДВ кинка.

Виллис и соавторы [208] проанализировали полную гамильтонову динамику ДВ кинка в модели ДСГ, введя две коллективные координаты $X(t)$ и $R(t)$ и соответствующие им сопряженные моменты как канонические переменные. Подобно гамильтонову формализму для модели СГ, в данном случае нужно добавить по крайней мере еще одну степень свободы (внутренние колебания) и модифицировать скобки Пуассона. После довольно длинных вычислений Виллис и соавторы [208] показали, что энергию ДСГ кинка при таком подходе можно представить в форме

$$H_{DB} = \frac{m^{(DB)}}{2} \left(\frac{dX}{dt} \right)^2 + \frac{m^{(R)}}{2} \left(\frac{dR}{dt} \right)^2 + U_{DB}(R), \quad (3.74)$$

где эффективная масса $m^{(DB)}$ задается уравнением (3.72),

$$m^{(R)}(r) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi} \left(\frac{\partial u^{(DB)}}{\partial R} \right)^2 = \frac{1}{4} m^{(SG)} \frac{\sinh r}{\cosh r} \left[1 - \frac{2r}{\sinh(2r)} \right], \quad (3.75)$$

и

$$U_{DB}(R) = m^{(SG)} c^2 \frac{\sinh r}{2 \cosh r} \left\{ 1 + \frac{\tanh^2 r}{\tanh^2 \tilde{R}} + 2\tilde{R} \left[\frac{1}{\sinh(2\tilde{R})} + \frac{\coth \tilde{R}}{\cosh^2 r} - \frac{\tanh^2 r \coth \tilde{R}}{2 \sinh^2 \tilde{R}} \right] \right\}, \quad (3.76)$$

где $\tilde{R} \equiv R/d$. Для малоамплитудных внутренних колебаний энергию $U_{DB}(R)$ можно представить в форме

$$U_{DB}(R) \approx m^{(DB)} c^2 + \frac{1}{2} m^{(R)} \omega_B^2(r) (R - R_0)^2, \quad (3.77)$$

где $R_0 = rd$, а $\omega_B(r)$ – частота внутренних колебаний,

$$\omega_B^2(r) = \frac{1}{m^{(R)}(r)} \left(\frac{d^2 U_{DB}}{dR^2} \right) \Big|_{R=R_0}. \quad (3.78)$$

Частота ω_B может быть найдена из уравнений (3.75), (3.76), и (3.78), также она может быть определена как некоторое собственное значение уравнения Шредингера (3.51), (3.52). Последний метод приводит к следующему результату [209] $\omega_B \approx \omega_{\min} \sqrt{1 - \beta^2}$, где

$$\beta = \frac{1}{2} \left[\left(1 + \frac{8}{\alpha^2} \tanh^2 r \right)^{1/2} - 1 \right], \quad (3.79)$$

и

$$\alpha = \frac{\tanh^2 r \sinh(2r)}{[\sinh(2r) - 2r]}. \quad (3.80)$$

Потенциал $U_{DB}(R)$, задаваемый уравнением (3.76), является ангармоничным. Поэтому при росте амплитуды колебаний "молекулы" они становятся нелинейными, и ангармоничность потенциала становится существенной. В результате этого могут возбуждаться гармоники высшего порядка и излучаться фононы. Однако взаимодействие внутренних колебаний кинка с фононами чрезвычайно мало, так оно происходит только за счет резонансов высокого порядка. Проведенное Бурдицом и соавторами [210] численное моделирование показало, что эффективное затухание внутренних колебаний пренебрежимо мало, даже когда они становятся сильно нелинейными.

В пределе $r \rightarrow \infty$ потенциал ДСГ (3.69) сводится к потенциалу СГ с периодом $a = \pi$, ДВ кинк (3.73) расщепляется на два отдельных СГ π -кинка, а частота $\omega_B \rightarrow 0$. Заметим также, что в дискретном случае гамильтониан (3.74) должен включать ПН потенциал для подкинков.

Кэмпбел и соавторы [195] провели численное исследование кинк-антикиновых столкновений в модели ДСГ и показали существование "резонансных окон", связанных с механизмом обмена энергии между трансляционными и внутренними модами кинков. Окна резонансных скоростей соответствуют ситуации, когда кинки сталкиваются неупруго и образуют бризер, а в противном случае кинки расходятся, не меняя своей идентичности. При $r > 1/4$ появляются качественно новые эффекты, а именно, результатом кинк-антикового столкновения может стать образование двух бризеров,двигающихся в разные стороны. Изменение энергии резонансов может быть изучено в рамках модели эффективных коллективных координат, которая трактует процессы рассеяния как столкновение двух "молекул", одна из которых соответствует ДВ кинку, а другая – ДВ антикинку.

3.4 Неупорядоченные подложки

В реалистических физических моделях взаимодействие нелинейных возбуждений (кинков или бризеров) с неоднородностями должно играть важную роль в механизмах переноса, так как кинки (или бризеры) могут захватываться локальными неоднородностями или отражаться от них. Более того, захват бризера может приводить к возбуждению *нелинейной примесной моды*. Возможность таких процессов позволяет установить связь между теорией нелинейных цепей и теорией гармонических решеток с дефектами (см., например, ссылки [211]–[214]).

Многие свойства взаимодействия солитонов с примесями уже обсуждались в рамках модели СГ – см. обзоры Кившаря и Маломеда [27], а также Гредескула и Кившаря [215]. В дискретной модели ФК у взаимодействия солитонов с примесями появляются два новых свойства, которые необходимо обсудить. Первое – это то, что в дискретной цепи кинк движется в присутствии эффективного потенциала ПН, амплитуда которого всегда меньше амплитуды потенциала подложки. Поэтому параметры кинка периодически изменяются, и этот простой механизм излучения фононов приводит к последующему пинингу кинка дискретностью решетки. В результате этого, эффекты дискретности, которые отсутствуют в модели СГ, могут существенно модифицировать адиабатическое рассеяние кинков [49]. Вторым важным свойством рассеяния кинков примесями в дискретной цепи является возможность возбуждения при рассеянии примесных мод. На самом деле такой эффект также возможен и в континуальных моделях при строгом учете неоднородности, но изменения частоты примесной моды дискретностью делают процесс их возбуждения более легким [216].

Простейшее обобщение модели ФК, позволяющее учесть дефекты различных типов, было изучено Брауном и Кившарем [49]. Модель ФК с беспорядком в общем случае можно описать следующим гамильтонианом [сравните с уравнениями (1.1) – (1.5)]

$$\mathcal{H} = \sum_j \left\{ \frac{m_j}{2} \left(\frac{dx_j}{dt} \right)^2 + \frac{g_j}{2} (x_{j+1} - x_j - a_0)^2 + U(x_j) \right\}$$

с потенциалом

$$U(x_j) = \varepsilon_j \left[1 - \cos \left(\frac{2\pi x_j}{a_s} \right) \right] + v(x_j),$$

где неоднородности учитываются через параметры m_j (изменение масс частиц), g_j (изменение межчастичного взаимодействия), ε_j (локальные изменения потенциала подложки) и $v(x_j)$ (некоторым добавочным изменением потенциала, создаваемым примесями). Уравнения движения для смещений атомов $u_j = x_j - ja_s$ имеют вид [мы рассматриваем здесь простейший случай с $a_0 = a_s$]

$$m_j \frac{d^2 u_j}{dt^2} + g_j(u_j - u_{j+1}) + g_{j-1}(u_j - u_{j-1}) + \varepsilon_j \sin u_j + v'(ja_s + u_j) = 0. \quad (3.81)$$

Если один атом цепи, скажем с номером $j = 0$, имеет свойства, отличные от всех остальных атомов, то такую неоднородность можно охарактеризовать локальным изменением параметров (в безразмерных единицах, введенных в главе 1), $\varepsilon_0 = 1 + \Delta\varepsilon$, $m_0 = 1 + \Delta m$, и $g_0 = g_{-1} = g + \Delta g$, так что изменение, обусловленное этим возмущением, $\delta\mathcal{H}$ гамильтониана цепи ФК можно записать как

$$\delta\mathcal{H} = \frac{\Delta m}{2} \left(\frac{du_0}{dt} \right)^2 + \frac{\Delta g}{2} [(u_1 - u_0)^2 + (u_0 - u_{-1})^2] + \Delta\varepsilon (1 - \cos u_0). \quad (3.82)$$

В континуальном приближении такая неоднородность учитывается изменениями типа $\varepsilon_j \rightarrow \varepsilon(x) = 1 + \Delta\varepsilon a_s \delta(x)$ и т. п.

Прежде всего заметим, что совместное действие нелинейности и беспорядка может изменить свойства кинков даже в стационарном случае. Эта проблему легче всего проанализировать в рамках модели SG, т. е. для континуальной версии цепи ФК. Действительно, модель SG с дефектами была предложена Берисвилем и Бишопом [217] с целью анализа ее линейных свойств. Некоторые точные результаты для модели SG с дельта-образными неоднородностями могут быть получены для стационарных состояний дефектов и нелинейных стационарных структур, возникающих вследствие эффекта пининга кинков на неоднородностях. Несколько случаев, для которых такие стационарные структуры могут быть рассмотрены аналитически, были изучены при линейном взаимодействии между дефектами и волновым полем, т.е. когда $v(x) \sim \lambda \delta(x - x_0)$ (см., например, работу [218]), а также для нелинейного взаимодействия (когда, например, $\varepsilon(x) \sim \lambda \delta(x - x_0)$, см. [219]). Разрыв производной, обусловленный такой δ -функцией, позволяет получить (для изолированных дефектов) нелинейные условия стационарности, которые могут быть найдены аналитически. С помощью этих точных результатов при наличии дефектов можно вычислить как корреляционную функцию, так и свободную энергию различных возможных конфигураций. Эта программа может быть реализована не только для одной или двух примесей, но также для случайного распределения дефектов в пределе их малой концентрации [218].

В обобщенной модели ФК наблюдается более сложное поведение, например, некоторые обобщения модели, лежащие за пределом линейного приближения для межатомного потенциала, приводят к некоторым качественно новым результатам, таким как существование деформированной конфигурации цепи [220] или образование разрывов, когда растяжение цепи превосходит некоторое критическое значение [221, 222]. Когда в цепи появляются локальные неоднородности, то они могут действовать как ловушки для пининга антикинков и одновременно повышать порог для разрыва цепи. Такой эффект был проанализирован Маломедом и Милчевым [223], которые показали, что порог разрыва у антикинка, захваченного неоднородностью с локальным уменьшением потенциала подложки, выше чем у свободного антикинка. Этот эффект они связали с наблюдением образования трещин из сдвиговых дислокаций в гетероструктурах III-V [44].

3.4.1 Эффективное уравнение движения

Рассмотрим вначале континуальное приближение модели ФК, которое описывается уравнением SG с неоднородными параметрами. В этом случае эффективное уравнение для координаты кинка можно получить при помощи упрощенной версии метода коллективных переменных [27, 224, 225]. В качестве примера мы рассмотрим простейший случай неоднородной модели SG

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \sin u = \epsilon f(x) \sin u, \quad (3.83)$$

где примесь моделируется введением внешнего потенциала

$$U_{\text{ext}}(x) = \int^x dx f(x).$$

Анализируя динамику кинка в рамках приближения коллективных координат мы можем получить простейшим путем некоторое уравнение движения для координаты (см., например, ссылки [86, 159]). Для получения такого уравнения заметим, что невозмущенная система SG имеет бесконечное число интегралов движения (т.е. величин, которые сохраняются при движении), среди них момент

$$P \equiv - \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\partial u}{\partial t} \frac{\partial u}{\partial x}. \quad (3.84)$$

Для кинка модели SG уравнение (3.84) принимает вид хорошо известного релятивистского выражения $P = mV/\sqrt{1-V^2}$, где V – скорость кинка. В присутствии возмущений момент перестает сохраняться. Используя уравнение (3.83), можно показать, что он меняется согласно уравнению

$$\frac{dP}{dt} = \epsilon \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) \frac{\partial}{\partial x} (\cos u),$$

если выполнены граничные условия $u \rightarrow 0$ (2π) при $x \rightarrow \pm\infty$. Адиабатический подход здесь основывается на предположении, что при достаточно малом значении параметра ϵ форма кинка не меняется и только координата кинка X начинает зависеть от времени как медленно изменяющаяся функция. В пределах этого приближения можно показать, что в нерелятивистском пределе динамика центра кинка задается следующим уравнением движения $m d^2 X/dt^2 = -U'(X)$, где

$$U(X) \equiv -2\epsilon \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{f(x)}{\cosh^2(x-X)}. \quad (3.85)$$

Здесь мы использовали приближенное выражение $P \approx m_k (dX/dt)$, справедливое для малых значений скорости. Таким образом, в рамках такого адиабатического приближения движение SG кинка можно представить как движение квазичастицы массы m под действием внешнего потенциала $U(X)$, задаваемого уравнением (3.85). Можно показать, что подобные свойства выполняются и для релятивистских кинков [146].

Следующие два случая естественно получаются из уравнения (3.85). Если функция $f(x)$ быстро меняется на расстояниях порядка длины кинка, то предположение о малости параметра ϵ должно выполняться. Например, в случае $f(x) = \delta(x)$ мы имеем [86] $U(X) = -2\epsilon \operatorname{sech}^2 X$. С другой стороны, если функция $f(x)$ меняется медленно, т.е. если характерная длина изменения (скажем L) намного больше ширины кинка, этим предположением о малости ϵ можно пренебречь, так как все параметры теории возмущения являются величинами порядка L^{-1} и мы остаемся с условием $U(X) \approx 4\epsilon f(X/L)$.

Приближение, использованное в приведенном выше выводе, основано на предположении, что кинк движется медленно через область примеси. В этом случае ширина кинка не меняется сильно и ее изменением можно пренебречь. Это соответствует, так называемому, "нерелятивистскому" взаимодействию кинка с примесью. Однако и в релятивистских эффектах можно учесть изменение ширины, введя одну или несколько дополнительных коллективных координат, связанных с шириной кинка [226, 227]. Более детальный анализ этого провели Воафо и Кофани [228]. Они показали, что кинк сужается в притягивающем и расширяется в отталкивающем потенциале примеси.

Представленная выше адиабатическая теория становится недействительной в случае, когда локализованная примесь допускает существование примесной моды – осциллирующей линейной моды, локализованной на ячейке с примесью. В этом последнем случае, как будет подробно показано далее, двумя эффективными коллективными координатами являются положение кинка и амплитуда примесной моды. Различные типы так называемых, резонансных взаимодействий солитонов и кинков с примесями были рассмотрены Беловой и Кудрявцевым [229], простейший пример такого взаимодействия представлен в параграфе 4.3.2.

В дискретной решетке ФК уравнение движения координаты кинка модифицируется ПН рельефом. Один из способов получения эффективного уравнения движения для кинка был уже упомянут в параграфе 3.2.1, он основан на проекционной технике развитой группой Виллиса. Другой подход базируется на лагранжевом формализме, который мы применим здесь только для того, чтобы показать, как реально работает этот метод (см., например, ссылки [49, 230, 231]).

Довольте начнем с лагранжиана неоднородной ФК цепи

$$L = \sum_j \left\{ \frac{m_j}{2} \left(\frac{du_j}{dt} \right)^2 - \frac{g_j}{2} (u_{j+1} - u_j)^2 - \varepsilon_j \left[1 - \cos \left(\frac{2\pi u_j}{a_s} \right) \right] \right\}. \quad (3.86)$$

Для того чтобы рассмотреть простейший случай одного точечного дефекта на узле $n = 0$ (случай нескольких примесей тоже может быть рассмотрен подобным способом), мы положим $\varepsilon_j = \varepsilon_s + \Delta\varepsilon \delta_{j0}$, $m_j = m_a + \Delta m \delta_{j0}$, и $g_j = g + \Delta g \delta_{j0}$. Введя безразмерные переменные $\tau = (c/a_s)t$ и $\phi_j = (2\pi/a_s)u_j$ и положив $\mu = a_s/l$, $c^2 = ga_s^2/m_a$, $l = c/\omega_0$, где $\omega_0^2 = 2\pi^2\varepsilon_s/m_a a_s^2$, мы приведем лагранжиан (3.86) к виду

$$L = A \sum_j \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{d\phi_j}{dt} \right)^2 \left(1 + \frac{\Delta m}{m_a} \delta_{j0} \right) - \frac{1}{2} (\phi_{j+1} - \phi_j)^2 \left(1 + \frac{\Delta g}{g} \delta_{j0} \right) \right\}$$

$$-\mu^2(1 - \cos \phi_j) \left(1 + \frac{\Delta \varepsilon}{\varepsilon_s} \delta_{j0} \right) \Bigg\},$$

где $A = m_a(c/2\pi)^2$. В принятых выше обозначениях параметр μ имеет смысл отношения шага решетки к ширине кинка. Теперь мы допустим, что величина μ мала, так что возмущенный кинк в дискретной цепи можно приближенно описать СГ кинком

$$\phi_j(\tau) = 4 \tan^{-1} e^{\mu \xi_j}, \quad (3.87)$$

где $\xi_j = j - Y(\tau)$, а $Y(\tau)$ является коллективной координатой кинка. Подставляя выражение (3.87) в Лагранжиан системы и оценивая затем суммы с помощью формулы суммирования Пуассона

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} h f(nh) = \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) \left[1 + 2 \sum_{s=1}^{\infty} \cos \left(\frac{2\pi s x}{h} \right) \right],$$

мы получим эффективный Лагранжиан в следующей приведенной форме [49]

$$\begin{aligned} L/A = 4\mu \left\{ \left(\frac{dY}{dt} \right)^2 - \frac{4\pi^2}{\sinh(\pi^2/\mu)} \cos(2\pi Y) \right\} + \\ \frac{2\mu^2}{\cosh^2(\mu Y)} \left\{ \left(\frac{dY}{dt} \right)^2 \left(\frac{\Delta m}{m_s} \right) - \left(\frac{\Delta g}{g} - \frac{\Delta \varepsilon}{\varepsilon_s} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (3.88)$$

Уравнение движения координаты кинка $X = \mu Y$ может быть получено из уравнения (3.88) непосредственно. Простейший анализ показывает, что дискретность добавляет некоторое потенциальное поле, связанное с ПН рельефом так, что кинк можно описать как эффективную частицу изменяющейся массы, двигающуюся в эффективном потенциале $U_{\text{eff}}(X) = U_{\text{PN}}(X) + U_{\text{im}}(X)$, где

$$U_{\text{PN}}(X) = \frac{2\pi^2 \mu}{\sinh(\pi^2/\mu)} \cos \left(\frac{2\pi X}{\mu} \right) \quad (3.89)$$

и

$$U_{\text{im}}(X) = \frac{1}{4} \left(\frac{\Delta g}{g} + \frac{\Delta \varepsilon}{\varepsilon_s} \right) \frac{\mu^3}{\cosh^2 X}. \quad (3.90)$$

Анализ движения кинка в окрестности примеси можно найти в работе Брауна и Кившаря [49], но качественная физическая картина такого взаимодействия довольно проста: движение кинка обуславливается потенциалами двух типов – локализованным (от примеси) и нелокальным (от периодического ПН рельефа). В частности, если кинк захвачен дискретностью не очень далеко от примеси, то его ПН частота ренормализуется:

$$\omega_j^2 = \omega_{PN}^2 - \frac{\mu^3}{2} \left(\frac{\Delta g}{g} + \frac{\Delta \varepsilon}{\varepsilon_s} \right) \frac{(1 - 2 \sinh 2X_j)}{\cosh^4 X_j}, \quad (3.91)$$

где частота ПН $\omega_{PN}^2 = [8\pi^4/\mu \sinh(\pi^2/\mu)]$, координата $X_j = (j + \frac{1}{2})\mu$, а ja_s – расстояние от примеси. Заметим, что потенциал локальной примеси одинаковым образом действует на кинк и антикинк.

Подобная техника может быть применена к ДНК промоутерам с целью объяснения их роли, как динамических активаторов транспорта РНК полимеразы вдоль цепи ДНК. С этой целью для кинков в неупорядоченной модели ФК, являющейся простейшей моделью ДНК цепи [103]–[106],[112],[232]–[234], вводится некоторый эффективный потенциал. Этим методом Салерно и Кившарь [231] показали существование динамически "активного" участка внутри ДНК промоутера, что качественно согласуется с экспериментальными данными [235].

Несколько интересных эффектов можно наблюдать для много-кинковой динамики, когда вблизи примеси взаимодействуют два или более кинков. В частности, когда движущийся кинк сталкивается с кинком, захваченным примесью, возможны три различных результата столкновения: депининг, захват и обмен [236]. Для кинков с разными полярностями результатом такого столкновения также может быть аннигиляция кинков на примеси. Рассеяние СГ бризера на примеси можно рассмотреть, по крайней мере для случая низкочастотных бризеров, как взаимодействие с примесью связанной пары кинков. Сложная динамика рассеяния бризера на примеси была показана Кенфаком и Кофани [237] и Жангом [238].

Обсужденные выше адиабатические эффекты основываются на приближении, в котором не учитываются потери энергии на излучение. Однако во время рассеяния на примесях кинк излучает фононы. Это может изменить общую картину рассеяния, добавляя в нее эффективные радиационные потери [27]. Действительно, в неоднородной модели ФК возможны три типа радиационных потерь:

(i) *Первый тип* радиационных потерь обусловлен существованием ПН рельефа, он уже был детально обсужден выше.

(ii) *Второй тип* таких резонансных эффектов обусловлен вызванным примесью изменением скорости кинка. Этот тип излучения кинка можно вычислить в первом порядке как излучение СГ кинка. Большое число таких задач рассмотрено в обзоре по теории возмущений солитона [27]. Важность радиационных эффектов такого типа была продемонстрирована Кившарем и др. [239] для случая рассеяния кинка на двух точечных примесях. Было показано, что для малых значений скорости коэффициент отражения кинка осцилляционно зависит от расстояния между примесями. Это обусловлено интерференцией излучения, испускаемого кинком.

(iii) *Третий тип* неупругих эффектов, которые не учитываются при адиабатическом подходе – это возбуждение у примеси локализованных мод при рассеянии кинка. Эта задача будет обсуждаться ниже в пределе модели СГ.

3.4.2 Точечные дефекты

Если функция $f(x)$ в уравнении (3.83) описывает случайные примеси, то мы можем рассмотреть простейший случай дельта-образных неоднородностей $\epsilon f(x) = \sum_n \epsilon_n \delta(x - a_n)$, где числа ϵ_n и a_n выбраны случайными, и предположить, что расстояния $b_n = a_{n+1} - a_n$ являются одинаково распределенными случайными числами с плотностью вероятности $p(b) = b_0^{-1} e^{-b/b_0}$. Тогда уравнение для координаты кинка X принимает форму $m d^2 X / dt^2 = -U'(X)$, где

$$U(X) = \sum_n u_n(X), \quad u_n(X) \equiv u(X - a_n), \quad u(X) \equiv -\frac{2\epsilon}{\cosh^2 X}. \quad (3.92)$$

Здесь, как и выше, мы предположили, что $P \simeq mV \simeq m dX/dt$. Таким образом, в рамках подхода коллективной координаты движение СГ кинка может быть описано как движение нерелятивистской частицы массы m в эффективном случайном потенциале, задаваемом уравнением (3.92).

В работе Гредескула и др. [240] было проанализировано рассеяние кинка в случае, когда беспорядок проявляется как случайно распределенные точечные примеси одинаковой интенсивности, т. е. при $\epsilon_n = \epsilon$. Общие методы, обычно используемые для зависящих от времени случайных возмущений (см., например, ссылки [241]–[243], а также обзоры [215, 244, 245]), не могут быть прямо применены к этой задаче, так как для случайно распределенных пространственных примесей мы не можем получить уравнение Фоккера-Планка [заметим, что потенциал (3.92) не является Марковским]. Градескул и др. [240] разработали статистическую процедуру вычисления средних значений движения кинка, например, средней скорости кинка, при условии, что его скорость достаточно велика, а протяженность примесей мала.

Одной из важных задач, связанных с динамикой ФК цепи, является влияние беспорядка на движение дислокаций в кристаллах с высоким ПН потенциалом. Базисные концепции дислокационной динамики в кристаллах с высоким ПН рельефом были сформулированы Аотм и Хиршем [246], а также Казанцевым и Покровским [247]. Здесь поперечное смещение дислокационной линии описывается как обусловленное тепловыми флуктуациями рождение кинк-антикинк-пар под действием приложенной постоянной силы. Экспериментальные данные показывают, что подвижность дислокаций тоже существенно зависит от точечных дефектов, например, легирование кристаллов атомами примеси может приводить к увеличению дислокационной скорости [248, 249]. Этот эффект можно объяснить в рамках модели ФК как следствие локального уменьшения ПН барьера, возникающего из-за взаимодействия между дислокацией и примесями [250, 251]. Упомянем также, что такие выводы были подтверждены многочисленными численными экспериментами, которые показали, что точечные дефекты в кристаллической решетке оказывают чрезвычайно сильный эффект на подвижность дислокаций [252, 253].

3.4.3 Внешняя неоднородная сила

Концепция кинка, как некоторой эффективной точечно-подобной частицы применима, строго говоря, только если внешнее поле или эффективная сила, создаваемая неоднородностями, не меняются быстро на пространственной шкале порядка ширины кинка. В противном случае следует ожидать некоторые различия между, например, условиями устойчивости для кинка, рассматриваемого как точечная частица, и для кинка, изучаемого как протяженный объект. С физической точки зрения такие отличия возникают в областях убывания силы. В частности, в присутствии статистической силы существуют стационарные решения для кинков с центрами, связанными (или совпадающими) с положением нулей этих сил. Этот результат следует из описанного выше подхода эффективной частицы.

Однако, условие устойчивости кинка в общем случае не является эквивалентным условию устойчивости, следующему из простого энергетического описания кинка как точечной частицы. Впервые это было отмечено Гонзалесом и Холистом [254] (см. также ссылки [255, 256]), которые рассмотрели очень специальную форму статической силы $F(x)$ в модели ϕ^4 , где существует точное решение для стационарного кинка $u_k(x) = A \tanh(Bx)$ с двумя параметрами A и B , определяемыми силой $F(x)$. Здесь линейная задача на собственные значения для

мало-амплитудных колебаний около кинка $u_k(x)$, благодаря специальному выбору $F(x)$, совпадает с линейным уравнением Шредингера с потенциалом Пеш-Теллера. Эту задачу можно решить точно, что позволяет описать устойчивость кинка как некоторого протяженного объекта. В результате, когда внешняя сила $F(x)$ имеет одну устойчивую ($x = 0$) и две неустойчивые ($x = x_{1,2}$) стационарные точки, кинк локализованный на локальном минимуме $x = 0$ становится *неустойчивым*, когда две точки максимума $x = x_{1,2}$ находятся вблизи центра кинка $x = 0$, а взаимодействие хвостов кинка с этими нулями достаточно сильно для того, чтобы сделать устойчивый кинк неустойчивым [254].

Подобные результаты позже были получены Холистом [256] для кинка в модели Клейн-Гордон с двойным-квадратическим потенциалом подложки. Более точно, модель изученная Холистом [256] имеет форму,

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + (|u| - 1) \operatorname{sgn}(u) = F(x), \quad (3.93)$$

где сила $F(x)$ была выбрана в форме

$$F(x) = \left\{ A - 1 + A(B^2 - 1)e^{-B|x|} \right\} \operatorname{sgn}(Bx) \quad (3.94)$$

для того чтобы иметь точное решение для формы кинка

$$u_k(x) = A \left(1 - e^{-B|x|} \right) \operatorname{sgn}(Bx). \quad (3.95)$$

Рассматривая кинк как точечную частицу, мы получим условие стабильности

$$\left(\frac{dF(x)}{dx} \right)_{x=0} > 0,$$

т. е. $AB^2 > 1$. Однако линейная задача на собственные значения для кинка (3.95) требует для устойчивости кинка выполнения неравенства $\Omega^2 > 0$, которое приводит к другому условию $AB > 1$. Простой анализ этих двух условий и экстремальных точек внешней силы $F(x)$ дает следующие результаты [256]: (i) когда сила (3.94) имеет *единственный ноль*, оба условия совпадают, (ii) когда сила (3.94) имеет *три нуля*, наличие дополнительных нулей может *дестабилизировать* кинк, если точка $x = 0$ устойчива, или *стабилизировать* его, в противном случае.

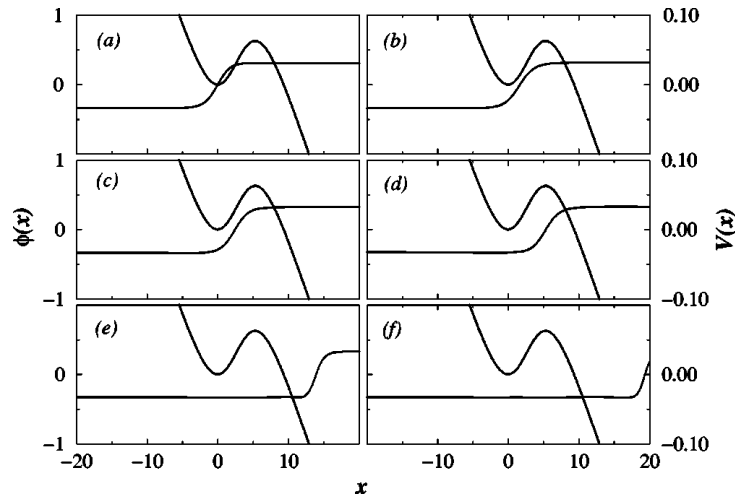


Рис. 3.15. Численное моделирование туннелирования кинка с подбарьерной кинетической энергией. Зигзагообразная кривая – потенциал, кривая типа ступеньки – солитон. Показано: (a) – начальная конфигурация при $t = 0$ и (b) – (f) – последующая динамика через равные моменты времени [257].

Эти результаты были получены с целью изменения возможности туннелирования кинка с под-барьерным значением кинетической энергии. Гонзалес и др. [257] исследовали, теоретически и численно, динамику движущегося кинка в асимметричной потенциальной яме с конечным барьером. Для больших значений ширины ямы, ширины барьера и/или высоты барьера кинк будет вести себя как классическая частица. С другой стороны, они получили условие для существования солитонного туннелирования при под-барьерном значении кинетической

энергии. Это условие связано с показанным выше эффектом изменения устойчивости кинка при наличии многих нулей внешней силы. Действительно, когда кинк ведет себя как классическая частица, минимум потенциала соответствует устойчивому кинку, сидящему в минимуме потенциальной ямы [см. рис. 3.15(a)], и он не может двигаться вправо от точки $x = 0$. С другой стороны, когда кинк в точке $x = 0$ становится неустойчивым, он уже будет двигаться вправо, пересекая барьер, даже если его центр массы находится в минимуме потенциала и его начальная скорость равна нулю [см. рис. 3.15(b)-(f)]. В этом случае кинк совершает туннелирование с под-барьерной кинетической энергией.

Гонзалес и др. [257] применили эти результаты к изучению движения кинка в неупорядоченных системах. Они рассмотрели силу $F(x)$ определенную так, что она имеет много нулей, максимумов и минимумов. Такая система описывает некоторый массив неоднородностей, который может быть проанализирован как множество элементов с двумя нулями и одним максимумом. Если для каждого элемента условие туннелирования выполняется, то кинк может пересечь всю зону неоднородности, даже если этот массив является полностью неупорядоченным. Таким образом, если условие туннелирования выполнено, то локализация движущегося кинка не возможна.

3.5 Ангармоническое межатомное взаимодействие

Для того, чтобы описать реалистические физические системы, нужно рассмотреть различные типы ангармонических межатомных потенциалов. Такое обобщение модели ФК позволяет описать на качественном уровне новые физические эффекты, такие как нарушение кинк-антикиновой симметрии, новые типы динамических солитонов (сверхзвуковых волн), разрушение антикиновых солитонов из-за разрыва цепи, изменение основного состояния модели, изменение характера взаимодействия между кинками и т.д.

Для моделирования реалистических физических систем существует несколько способов введения в ФК модель ангармонического межатомного взаимодействия. В качестве примера мы кратко обсудим несколько механизмов взаимодействия между атомами, адсорбированными на поверхности кристалла (детали можно найти, например, в работах [36, 258, 259]).

Если адатомы имеют заряды, то между ними возникает кулоновское отталкивание $V_{\text{int}}(x) \approx e^2/x$ (e – заряд адатома), действующее между ними на расстояниях $x < a^*$ (a^* – радиус экранирования, который для полупроводниковой подложки совпадает с дебаевским радиусом экранирования, а для металлической подложки он равен обратному моменту Томаса-Ферми) [260]. Для полупроводниковой подложки значение a^* достаточно велико и поэтому основной вклад в потенциал взаимодействия вносит степенной закон $V_{\text{int}}(x) \propto x^{-1}$. Для адсорбции на металлической подложке значение радиуса экранировки a^* имеет порядок постоянной решетки; для $x > a^*$ взаимодействие адатомов имеет диполь-дипольный характер: $V_{\text{int}}(x) \approx 2p_A^2/x^3$, где p_A – дипольный момент адатома [261]. Если адатомы нейтральны, то их взаимодействие прямо связано с перекрытием их электронных оболочек, которое экспоненциально убывает с увеличением расстояния $V_{\text{int}}(x) \propto \exp(-\beta x)$ [258]. Более сложные законы взаимодействия возможны при, так называемом, "непрямом" механизме взаимодействия адатомов [36, 258, 259], который можно приблизительно описать следующим обобщенным законом

$$V_{\text{int}}(x) \sim x^{-n} \sin(2k_F x + \phi), \quad (3.96)$$

где n может иметь значения от 1 до 5 в зависимости от электронной структуры подложки, ϕ – некоторая постоянная фаза и k_F – момент Ферми электронов подложки. В последнем случае некоторое притяжение (или "эффективное" притяжение) адатомов происходит только на определенных расстояниях.

Для того чтобы охватить достаточно широкий класс физически важных систем мы рассмотрим следующие потенциалы взаимодействия¹:

(i) *Экспоненциальный*

$$V_{\text{int}}(x) = V_0 \exp[-\beta(x - a_s)], \quad (3.97)$$

где V_0 – энергия взаимодействия между адатомами, занимающими соседние минимумы потенциала подложки, а параметр β характеризует ангармоничность потенциала;

(ii) *Степенной*

$$V_{\text{int}}(x) = V_0 \left(\frac{a_s}{x} \right)^n, \quad (3.98)$$

где n – целое число ($n \geq 1$);

¹ Здесь следует упомянуть еще один часто возникающий в приложениях периодический потенциал межузельного взаимодействия $V_{\text{int}}(x) = V_0[1 - \cos(x)]$ – см., например, модель магнитной цепи (2.4) и уравнение (4.56). При таком взаимодействии топологический солитон перестает быть топологически устойчивым, так как узкий кинк $u_n = 0$, при $n \leq 0$, $u_n = 2\pi$ при $n > 0$ в цепочке с потенциалом подложки с периодом 2π эквивалентен основному состоянию $u_n \equiv 0$. Здесь кинк может существовать только при энергии взаимодействия V_0 превышающем некоторое пороговое значение. В термализованной цепи такой кинк всегда будет иметь конечное время жизни (*примечание переводчика*).

(iii) *потенциал Морса*

$$V_{\text{int}}(x) = V_m \left[e^{-2\beta(x-a_0)} - 2e^{-\beta(x-a_0)} \right], \quad (3.99)$$

где a_0 – равновесное расстояние, V_m – глубина потенциальной ямы; и, на конец,

(iv) *Двухямный потенциал*

$$V_{\text{int}} = V_m \left[\frac{1}{2} \beta^4 (x - a_*)^4 - \beta^2 (x - a_*)^2 \right]. \quad (3.100)$$

Последний потенциал имеет два минимума при $x = a_* \pm \beta^{-1}$. Его качественно можно приблизить осциллирующим потенциалом (3.96), который возникает при "непрямом" взаимодействии адатомов.

Потенциалы (3.97) и (3.98) являются отталкивающими. Конечно можно добавить притягивающую ветвь формы $V_{\text{int}} \propto x$, так чтобы результирующий потенциал имел минимум при некотором расстоянии x_0 . Такая модификация будет давать изменения только для случая конечной цепи. Однако в данном параграфе мы рассматриваем бесконечную цепочку.

Потенциалы (3.97) и (3.98) являются выпуклыми², т.е. $V''_{\text{int}}(x) > 0$ для всех $x > 0$, а потенциалы (3.99) и (3.100) являются невыпуклыми. Потенциал (3.99) является выпуклым при $x > a_0 + \beta^{-1} \ln 2$, а потенциал (3.100) – в интервале $a_* - \beta^{-1}/\sqrt{3} < x < a_* + \beta^{-1}/\sqrt{3}$. В результате этого, при некоторых значениях параметров a_0 (или a_*), β , и V_m основное состояние системы становится нетривиальным и его спектр возбуждений меняется. Модель ФК с невыпуклыми потенциалами (3.99) и (3.100) будет рассмотрена в параграфе 3.5.2. Экспоненциальный потенциал (3.97) и, особенно, степенной потенциал (3.98) являются дальнедействующими потенциалами. Следовательно, здесь нужно учесть не только взаимодействие ближайших соседей, но и взаимодействие дальних соседей. Такого типа задачи будут обсуждаться в параграфах 3.5.3 и 3.5.4, где мы покажем, что взаимодействие всех соседей изменяет только параметры системы при экспоненциальным взаимодействием (3.97), в то время как для случая степенного взаимодействия (3.98) уравнение движения системы становится нелокальным даже в континуальном приближении.

3.5.1 Короткодействующее взаимодействие

При слабой ангармоничности межатомного взаимодействия потенциал можно разложить в ряд Тейлора и получить следующее уравнение движения [165]

$$\frac{d^2 u_n}{dt^2} + \sin u_n = V''_{\text{int}}(a_s) (u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) \left[1 + \frac{V'''_{\text{int}}(a_s)}{2V''_{\text{int}}(a_s)} (u_{n+1} - u_{n-1}) \right].$$

Пренебрегая эффектами дискретности, т.е. используя континуальное приближение, это уравнение можно свести к форме

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - d^2 \left[1 + \alpha d \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) \right] \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \sin u = 0, \quad (3.101)$$

где мы ввели параметр $d = a_s \sqrt{g}$, $g = V''_{\text{int}}(a_s)$, и параметр ангармоничности

$$\alpha = \left(\frac{a_s}{d} \right) \frac{V'''_{\text{int}}(a_s)}{V''_{\text{int}}(a_s)}. \quad (3.102)$$

Ангармоничность не меняет спектр линейных возбуждений (фононов) цепи. Однако кинковое решение уравнения (3.101) будет отличаться от решения для гармонической ФК цепи. Для малых α стационарное кинковое решение может быть найдено в рамках теории возмущений [27]

$$u_k(z) = u_k^{(SG)}(z) + \alpha u_\alpha(z), \quad (3.103)$$

где

$$u_\alpha(z) = -\frac{4}{3} \tan^{-1}(\sinh z) \operatorname{sech} z \quad (3.104)$$

с $z = x/d$. Простой анализ показывает, что ангармоничность межатомного взаимодействия разрушает симметрию между кинком и антикинком, так как согласно уравнению (3.103), коррекция u_α не зависит от знака топологического заряда кинка σ . Это значит, что эффективная ширина кинка изменяется на величину $\sigma\alpha(\pi d/3)$, т.е.

$$d_{\text{eff}} = d (1 - \pi\sigma\alpha/3). \quad (3.105)$$

² В книге функция $V(x)$ называется выпуклой, если она выпукла вниз (т.е. $V''(x) > 0$), и вогнутой, если она выпукла вверх (т.е. $V''(x) < 0$).

Это приводит к соответствующему изменению других параметров, характеризующих свойства кинков и антикинков, например, эффективной массы $m_\sigma \approx m^{(SG)} (1 + \pi\sigma\alpha/6)$ и амплитуды ПН потенциала, которую можно оценить как

$$E_{PN} \approx E_{PN}^{(SG)}(g) - \frac{2\pi}{3}\sigma\alpha g \frac{dE_{PN}^{(SG)}(g)}{dg}, \quad (3.106)$$

где функция $E_{PN}^{(SG)}(g)$ задается уравнением (3.8). Мы также заметим, что энергия рождения кинк-антикинк-пары задается выражением

$$\varepsilon_{\text{pair}} = \varepsilon_{\text{pair}}^{(SG)} \left(1 - \frac{4}{27}\alpha^2\right), \quad \varepsilon_{\text{pair}}^{(SG)} = 2\varepsilon_k^{(SG)}. \quad (3.107)$$

Такое нарушение симметрии между кинком и антикинком было впервые обнаружено Милчевым и Марковым [262] (см. также ссылки [263, 264]). Как показал Zhang [265], изменение формы кинка может приводить к появлению у него низко-частотных (или высоко-частотных) внутренних мод.

Для экспоненциального межатомного потенциала (3.97) безразмерные параметры g и α равны $g = V_0\beta^2$ и $\alpha = -\beta a_s/d$. Если параметр ангармоничности α отрицателен, то эффективная ширина кинка ($\sigma = +1$) будет больше, в то время как ширина антикинка ($\sigma = -1$) будет меньше чем у СГ кинка. Это явление имеет простую физическую интерпретацию. Действительно, эффективные силы взаимодействия для кинка (т.е. в области локального сжатия цепи) превышают силы для антикинка (в области локального растяжения цепи). Поэтому, для тех же самых значений параметров системы V_0 и β , кинк, по сравнению с антикинком, характеризуется меньшими значениями эффективной массы и Пейерлс-Набарровского барьера. Это качественное рассмотрение подкрепляется рисунком 3.16, взятым из работы Брауна и др. [165], который представляет результаты вычисления зависимостей $E_{PN}(g)$ и $m(g)$ для ФК модели при учете только взаимодействия между ближайшими соседними атомами, но в отличие от стандартной модели ФК, потенциал взаимодействия является экспоненциальным, как в уравнении (3.97). Хорошо видно, что "расщепление" кривых на рисунке 3.16 становится тем больше, чем больше значение параметра β .

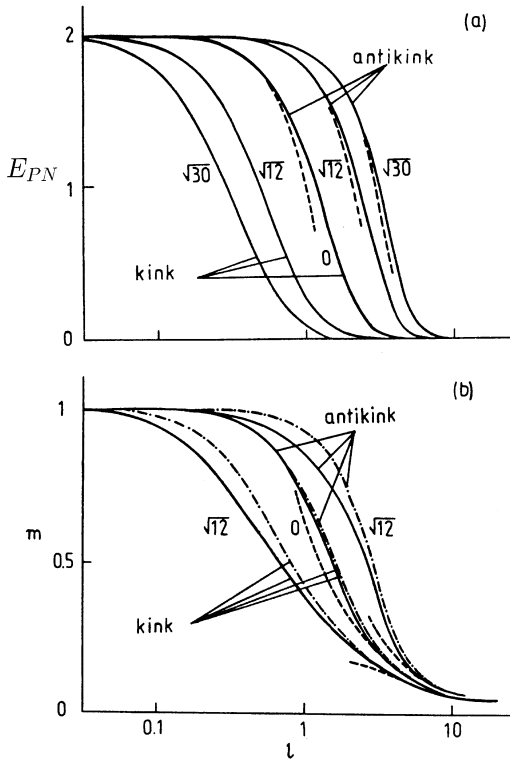


Рис. 3.16. Амплитуда ПН потенциала (a) и эффективная масса (b) для кинка и антикинка как функции параметра $l = \pi\sqrt{g}$ для случая, когда ближайшие соседи взаимодействуют через экспоненциальные силы (3.97). Приведены кривые для разных значений параметра ангармоничности β : $\beta = 0$ (классическая модель ФК), $\beta = \sqrt{12}/2\pi$ и $\beta = \sqrt{30}/2\pi$. Пунктирные кривые соответствуют аналитическим асимптотикам [165].

Уравнение (3.105) показывает, что ширина антикинка стремится к нулю при возрастании параметра ангармоничности β . Для того чтобы проанализировать этот эффект более детально, Милчев и Марков [262] применили операторное соотношение $u_{n\pm 1} = \exp(\pm a_s \nabla) u_n$ к дискретной версии модели ФК с экспоненциальным взаимодействием и получили операторное уравнение

$$2g \exp\{-\beta[\sinh(a_s \nabla)u]\} \sin\{\beta[\cosh(a_s \nabla) - 1]u\} = \beta \sin u. \quad (3.108)$$

Сохраняя в уравнении (3.108) только производные наименьшего порядка, его можно свести к уравнению [221]

$$d^2 \frac{d^2 u}{dx^2} \exp \left(\alpha d \frac{du}{dx} \right) = \sin u. \quad (3.109)$$

Интегрирование уравнения (3.109) дает

$$1 - \left(1 - \alpha d \frac{du}{dx} \right) \exp \left(\alpha d \frac{du}{dx} \right) = \frac{\beta^2}{g} (C - \cos u), \quad (3.110)$$

где C – постоянная интегрирования. Значение $C = 1$ соответствует сепаратрисной кривой на фазовой плоскости (u_x, u) , которая соединяет точки $u = 0$ и $u_x = 0$. Эта гомоклиническая траектория соответствует кинковому (антикиновому) решению уравнения (3.109). Подставив $u = \pi$ в уравнение (3.110), мы получим уравнение

$$\left(1 - \alpha d \frac{du}{dx} \right) \exp \left(\alpha d \frac{du}{dx} \right) = 1 - \frac{2\beta^2}{g}, \quad (3.111)$$

которое определяет значение u_x в центре кинка. Легко видеть, что уравнение (3.111) не имеет решения для антикинка ($u_x > 0$) при $\beta > \beta_{\text{cr}} = \sqrt{g/2}$, т.е. если $\alpha < \alpha_{\text{cr}} = -1/\sqrt{2}$. В этом случае сепаратриса, соответствующая антикинку (избыточной вакансии) имеет разрыв (т.е., $u_x \rightarrow \infty$). Последнее означает, что экспоненциальный потенциал (3.97) не может сопротивляться растяжению цепи и цепочка должна разорваться на две несвязанные (полу-бесконечные) части [221]. Проведенный Милчевым и Mazzucchelli [266] анализ показал, что эффективная ширина антикинка стремится к нулю как $d_{\text{eff}} = d\sqrt{1-2\alpha^2}$ при $\alpha \rightarrow \alpha_{\text{cr}}$. Энергия антикин-антикинового отталкивания $v_{k\bar{k}}(R) \propto \exp(-R/d_{\text{eff}})$ тоже стремится к нулю при $\alpha < \alpha_{\text{cr}}$. Таким образом, для достаточно большой ангармоничности межатомного потенциала, антикинки могут приближаться друг к другу, создавая в цепи кластеры избыточных вакансий, и это объясняет эффект "разрыва" цепи. Такой эффект может наблюдаться при столкновении кинка и антикинка, а также при взаимодействии кинка с неоднородностями (такими, как границы раздела) [267].

Конечно, использованное выше континуальное приближение становится недопустимым при $\alpha \rightarrow \alpha_{\text{cr}}$, даже в случае $g \rightarrow \infty$. Предсказываемый "разрыв" атомной цепи является артефактом неприменимого здесь континуального приближения. Такой "разрыв" означает только то, что эффективная ширина кинка становится *меньше* шага решетки a_s , а энергия разупорядочивания регулярной цепи антикинов достаточно мала. Реальный разрыв цепи возможен только для невыпуклых межатомных потенциалов, таких как потенциал Морса (3.99) (см. далее главу 5).

В случае когда $\alpha \sim \alpha_{\text{cr}}$, параметры антикинка можно найти при помощи приближения слабой связи [155, 165]. Для $\alpha < \alpha_{\text{cr}}$ амплитуда ПН потенциала стремится к величине амплитуды потенциала подложки $\varepsilon_s = 2$ (см. рис. 3.16), так что антикинк не может свободно двигаться вдоль цепи и находится в сильно-связанном состоянии, обусловленном ямой ПН потенциала. С другой стороны, кинк (локальное сжатие цепи) движется вдоль ангармонической ФК цепи более свободно, чем вдоль гармонической, так как $d_{\text{eff}}(\sigma = +1) > d$ и $E_{PN}(\sigma = +1) < E_{PN}^{(SG)}$.

Изолированные кинки и антикинки ангармонической цепи допускают, так-называемые, *сверхзвуковые ударные волны*. Для того чтобы показать это, давайте опустим потенциал подложки. Тогда цепочка атомов, взаимодействующих через экспоненциальные, силы будет совпадать с хорошо известной решеткой Тоды [268]–[270]. Солитон Тоды имеет следующую форму

$$u_n(t) = ma_s + \frac{1}{\beta} \ln \left[\frac{1 + \exp(-2\kappa)\phi_n(t)}{1 + \phi_n(t)} \right], \quad (3.112)$$

где

$$\phi_n(t) = \exp(z_n/d_{\text{eff}}), \quad z_n = na_s - vt. \quad (3.113)$$

Солитон в решетке Тоды может двигаться со скоростью $v > c$, он характеризуется эффективной шириной $d_{\text{eff}} = a_s/2\kappa$, массой $m = 1/\beta d_{\text{eff}}$, моментом $p = mv$ и энергией $\varepsilon_{\text{Toda}} = 2V_0 (\sinh \kappa \cosh \kappa - \kappa)$. Используемый выше параметр $\kappa = \kappa(v)$ определяется из уравнения $(\sinh \kappa)/\kappa = v/c$ (напомним, что мы используем единицы в которых $c = d = a_s\sqrt{g}$). Тодовский солитон является кинко-подобным возбуждением,двигающимся вдоль цепи и вызывающим смещение ее атомов на $\Delta u = -ma_s$. Такое возбуждение является *динамическим* и не может быть стационарным подобно топологическому кинку модели ФК. Однако, можно предположить, что солитон, подобный Тодовскому, может некоторое конечное время двигаться в ФК цепи. Под действием периодического потенциала подложкидвигающийся солитон будет терять кинетическую энергию, уменьшая свою скорость. Когда значение v приблизится к скорости звука c , Тодовский солитон должен распасться на ФК кинки и излучение. Общее число ФК кинков может быть оценено с точки зрения топологических ограничений: $n_k = [m - 1/2]$, где квадратные скобки [...] обозначают целую часть действительного числа.

Действительно, сверхзвуковое движение топологических солитонов было описано Савиным [271] для модели ϕ^4 с ангармоническим межатомным взаимодействием. Он нашел, что для определенных значений скорости кинка, когда амплитуда смещений атомов Δu точно согласуется с шириной двухъямного потенциала, $\Delta u = -a_s$,

сверхзвуковой кинк движется почти без излучения фононов. Такой сверхзвуковой кинк можно рассматривать как n акустических солитонов Буссинеска, связанных вместе топологическим ограничением, обусловленным потенциалом подложки (сумма их амплитуд должна точно совпадать с шириной барьера потенциала ϕ^4). Максимальное число кинков, которых можно связать вместе в один кинк, зависит от параметра ангармоничности взаимодействия и возрастает вместе с ним. Так что для слабой ангармоничности существует только одно сверхзвуковое значение скорости кинка ($n_{\max} = 1$), но при более сильном ангармонизме число допустимых дискретных значений скорости возрастает.

Позже подобный результат получили Золотарюк и др. [272] с помощью псевдоспектрального метода (см. параграф 3.2.4) для ФК цепи, расположенной на синусоидальном потенциале подложки, когда взаимодействие атомов описывается экспоненциальным потенциалом (3.97). Снова было обнаружено, что сверхзвуковой 2π -кинк имеет иерархию состояний, $n = 1, 2, \dots, n_{\max}$ (каждое состояние соответствует кинку, движущемуся только с одной своей определенной скоростью), каждое из которых может быть рассмотрено как связанные вместе n акустических солитонов Тоды, сумма амплитуд которых совпадает с периодом потенциала подложки a_s . Более того, также были найдены кратные сверхзвуковые $2Q\pi$ -кинки с топологическим зарядом $Q > 1$ и они также обладают такой же иерархией состояний. Все эти решения асимптотически неустойчивы, т. е. если их слегка модифицировать, например, изменить расстояние между акустическими подсолитонами в n -ом состоянии кинка, то у кинка появляется осциллирующий фон. Однако стартуя с формы кинка, полученной псевдоспектральным методом, и проведя молекулярно-динамическое моделирование, авторы показали, что эти кинки динамически устойчивы. Наконец отметим, что все эти решения существуют только для кинков (для локального сжатия цепи).

Интересно отметить, что для специальной формы межатомного потенциала

$$V_{\text{int}}(x) = \frac{g}{2}(x - a_s)^2 [1 + \gamma(x - a_s)^2], \quad (3.114)$$

где параметр ангармонизма имеет определенное значение $\gamma = 1/48$, уравнение движения модели ФК в континуальном пределе имеет точное кинковое решение стандартной формы

$$u_k(x, t) = 4 \tan^{-1} \exp \left\{ -\frac{(x - vt)}{d_{\text{eff}}} \right\}, \quad (3.115)$$

которое может двигаться с *любой* скоростью v [273, 274]³.

Эффективная ширина кинка (3.115) задается формулой

$$d_{\text{eff}} = \frac{a_s}{\sqrt{6}} \left\{ \left[\left(\frac{v}{c} \right)^2 - 1 \right] + \sqrt{\left[\left(\frac{v}{c} \right)^2 - 1 \right]^2 + \frac{1}{3} \left(\frac{a_s}{d} \right)^2} \right\}^{-1/2}, \quad (3.116)$$

так что в пределе $|v| \ll c$ ширина кинка приближается к значению, соответствующему стандартной модели ФК $d_{\text{eff}} = d\sqrt{1 - (v/c)^2}$. Для случая сверхзвукового движения, когда $|v| \gg c$, ширина кинка задается выражением $d_{\text{eff}} \approx a_s c / \sqrt{12(v^2 - c^2)}$, которое выглядит подобно соответствующей формуле для ширины динамического солитона Тоды.

3.5.2 Невыпуклые межатомные потенциалы

В предыдущих параграфах мы предполагали, что в цепи межатомное взаимодействие описывается выпуклой функцией, т.е. $V''_{\text{int}}(x) > 0$ для всех $x > 0$. Противоположный случай вогнутого потенциала, т.е. когда $V''_{\text{int}}(x) < 0$, с физической точки зрения менее интересен, так как согласно неравенству

$$V_{\text{int}}(a - \Delta a) + V_{\text{int}}(a + \Delta a) - 2V_{\text{int}}(a) < 0, \quad (3.117)$$

все атомы будут стремиться занять одну яму потенциала подложки.

В настоящем параграфе мы рассмотрим невыпуклый потенциал межатомного взаимодействия, который имеет точку перегиба a_i , задаваемую уравнением $V''_{\text{int}}(a_i) = 0$. Модель ФК с таким потенциалом обладает сложными свойствами. Сильная нелинейность ее динамики обусловлена существованием двух конкурирующих шкал длины: периода потенциала подложки $a_s = 2\pi$ и шкалой, задаваемой точкой перегиба a_i , при которой сила межатомной связи достигает своего максимума. Для определенности давайте предположим, что потенциал V_{int}

³ Отметим, что более точный анализ дискретной модели показывает отсутствие у кинка сплошного интервала скоростей. Здесь, как и для цепи с кубическим ангармоническим потенциалом, спектр скоростей может состоять только из отдельных значений скорости (*примечание переводчика*).

является выпуклым до точки перегиба, т.е. $V''_{\text{int}} > 0$ для $x < a_i$, и вогнутым на больших расстояниях подобно потенциалу Морса (3.99). Противоположный случай можно свести к этому, заменив кинки антикинками.

Невыпуклый потенциал $V_{\text{int}}(x)$, конечно, является ангармоническим. Так, когда ангармоничность достаточно велика, антикинки в цепи могут приводить к ее разрыву. В противоположность к проанализированному выше случаю экспоненциального потенциала, теперь разрыв цепи является действительным разрушением цепи на две независимые полубесконечные цепи, вследствие притягивающего взаимодействия между антикинками [222]. Более точно, взаимодействие антикинок может привести к созданию кластера из n антикинок, что позволит понизить энергию системы если $n > n_{\text{cr}}$. Критический размер кластера n_{cr} может быть оценен из неравенства

$$V_{\text{int}}(n_{\text{cr}}a_s) + V_{\text{int}}(2a_s) \geq V_{\text{int}}(n_{\text{cr}}a_s + a_s) + V_{\text{int}}(a_s), \quad (3.118)$$

так что $n_{\text{cr}} \approx a_i/a_s$. Таким образом, разрыв цепи здесь связан с ростом числа антикинок, процесс рождения которых напоминает фазовый переход первого рода инициированный тепловыми флуктуациями.

Другим свойством модели ФК с невыпуклым межатомным взаимодействием является неустойчивость ее тривиального основного состояния (ОС). Из вида уравнения (3.117) мы можем ожидать, что тривиальное ОС становится неустойчивым при $a_i < a_s$, т.е. когда $V''_{\text{int}}(a_s) < 0$. Действительно, легко показать, что при $V''_{\text{int}}(a_s) \leq -1/4$ тривиальное ОС [см. рис. 3.17(a)] становится неустойчивым и цепочка будет димеризована, так что короткие и длинные связи будут чередоваться, как показано на рис. 3.17(b) для ФК цепи с межатомным взаимодействием Морса потенциал!Морса [220, 275]. Это явление обусловлено тем фактом, что средняя энергия одной длинной и одной короткой связи меньше, чем энергия связи с промежуточной длиной. Уменьшая дальше значение $V''_{\text{int}}(a_s)$, основное состояние цепи может стать тримерным при $V''_{\text{int}}(a_s) \leq -1/3$ [рис. 3.17(c)], тетрамерным [рис. 3.17(d)], пентамерным [рис. 3.17(e)], и т.д. Простой линейный анализ показывает, что при

$$V''_{\text{int}}(a_s) \leq -\frac{1}{2} \left[1 - \cos \left(\frac{2\pi}{q} \right) \right], \quad (3.119)$$

тривиальное ОС становится неустойчивым относительно появления суперструктуры с периодом $a = qa_s$ [неравенство (3.119) может выполняться только при $q > 2$].

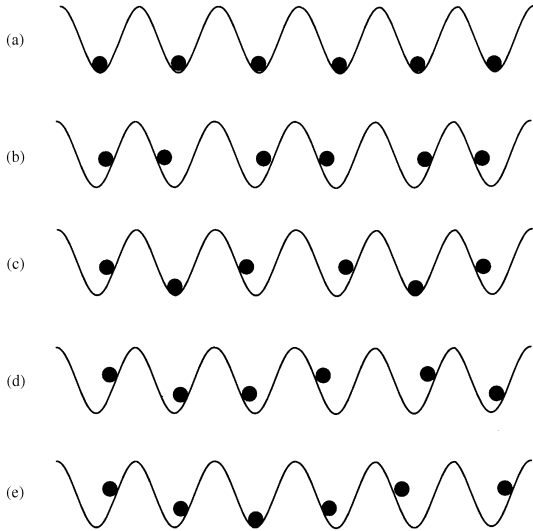


Рис. 3.17. Основное состояние ФК модели с межатомным потенциалом Морса (3.99): (a) недеформированная цепь, (b) димерное ОС, (c) тримерное ОС, (d) тетрамерное ОС и (e) пентамерное ОС [220].

Нахождение всех конфигураций основных состояний для модели ФК с невыпуклым межатомным взаимодействием является довольно сложной задачей, так как система стационарных уравнений $\partial U / \partial u_n = 0$ (где U – полная потенциальная энергия) имеет необычно много решений, и только одно из них является основным состоянием, а остальные соответствуют метастабильным и неустойчивым конфигурациям. Грифитц и Чоу [276] предложили алгоритм, прямо направленный на нахождение ОС и действующий для произвольных потенциалов $V_{\text{sub}}(x)$ и $V_{\text{int}}(x)$. Согласно этим авторам, основное состояние бесконечной цепи можно найти как решение функционального уравнения для нахождения собственных значений ($u, u' \in [-a_s/2, +a_s/2]$),

$$\epsilon_0 + \tilde{V}(u') = V_{\text{sub}}(u') + \min_u [V_{\text{int}}(u' - u - a_s) + \tilde{V}(u)]. \quad (3.120)$$

Функция $\tilde{V}(u)$ называется эффективным потенциалом [она имеет тот же самый период, как и первоначальный потенциал подложки, $\tilde{V}(u+a_s) = \tilde{V}(u)$], а значение ϵ_0 является средним значением энергии на одну частицу в ОС.

Было показано [276, 277], что функция $\tilde{V}(u)$ всегда существует и соответствующее значение ϵ_0 , удовлетворяющее уравнению (3.120), определяется однозначно. Можно построить отображение

$$u = M(u'), \quad (3.121)$$

получающееся при нахождении u которое, при данном u' , минимизирует правую часть уравнения (3.120). Точка притяжения этого отображения, $u_{n+1} = M(u_n)$, генерирует соответствующую конфигурацию ОС: $x_n = na_s + u_n$.

С целью получить некоторую физическую интерпретацию уравнений (3.120) и (3.121), давайте рассмотрим полубесконечную цепь атомов с граничным атомом, фиксированным в положении u_0 [278]. Предположим, что оставшаяся часть цепи свободно релаксирует к состоянию с минимальной энергией, конфигурация которого соответствует граничному условию. Тогда значение производной $d\tilde{V}(u_0)/du_0$ дает величину силы, которую нужно приложить для удержания краевого атома в положении с $u = u_0$. В этом случае положение n -го атома будет задаваться функцией $M^n(u_0)$.

Обычно функциональное уравнение (3.120) решается численно с использованием сетки из ста (или более) равномерно расположенных точек в интервале вокруг точки $u = 0$ и применения правой части уравнения (3.120) к функциям, определенных на этих точках. Последовательность итераций $\tilde{V}^{(n)}$ останавливается, когда $\tilde{V}^{(n+1)}$ и $\tilde{V}^{(n)}$ отличаются только на константу ϵ_0 в пределах выбранной точности. Заметим, что для потенциала взаимодействия с жестким ядром уравнение (3.120) имеет аналитическое решение [279].

Как типичный пример, рассмотрим принадлежащую Маршанду и др. [280] упрощенную модель ФК, в которой синусоидальный потенциал подложки $V_{\text{sub}}(x)$ заменен последовательностью парабол, $(1 - \cos x_n) \rightarrow \frac{1}{2}u_n^2$. Для двухъямного межатомного потенциала (3.100) с $\beta = 1$, $a_* = a_s + \delta$, и $V_m = \frac{1}{2}K$, гамильтониан приобретет форму

$$H = \sum_n \left[\frac{1}{2} \left(\frac{du_n}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2} u_n^2 + \frac{1}{4K} (u_{n+1} - u_n - \delta)^4 - \frac{1}{2K} (u_{n+1} - u_n - \delta)^2 \right]. \quad (3.122)$$

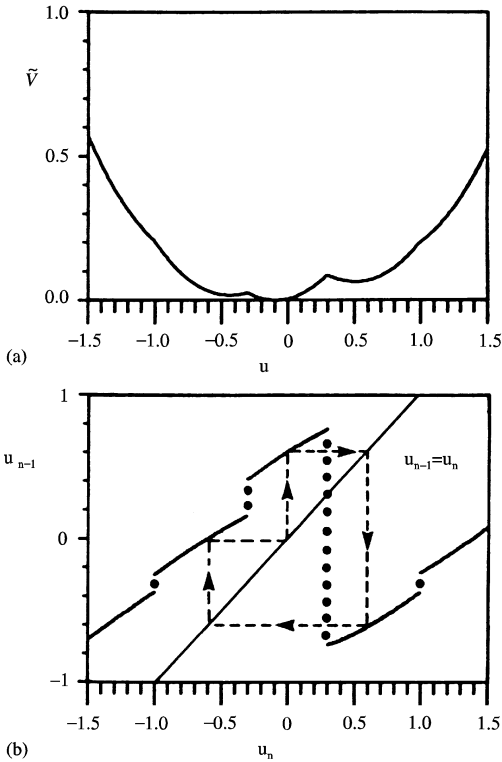


Рис. 3.18. (а) Эффективный потенциал $\tilde{V}(u)$ и (б) соответствующее отображение $u_{n+1} = M(u_n)$ для модели (3.122) с двухъямным межатомным потенциалом при $K = 0.5$ и $\delta = 0.33$. Также в части (б) показаны разрывы (точечные линии), линия $u_{n+1} = u_n$ и предельный цикл периода $q = 3$ [280].

На рис. 3.18 приведен пример эффективного потенциала $\tilde{V}(u)$ и соответствующего ему отображения $M(u)$, полученного для этой модели [280]. Заметим, что функция $\tilde{V}(u)$ непрерывна, но имеет разрывы первой производной в тех же точках, где разрывно отображение M . Это соответствует случаю, когда основное состояние "пининговано" на потенциале подложки (для несоизмеримой конфигурации ОС, при котором атомы цепи могут "скользить" под действием нулевой силы, следует ожидать гладкость функций $\tilde{V}$ и M).

Фазовая диаграмма, полученная Маршандом с соавторами [280] для модели (3.122), представлена на рис. 3.19. Различные конфигурации ОС обозначены отношением двух целых чисел p/q , где q характеризует

период модуляции структуры $a = qa_s$, а p задает число длинных связей в одной элементарной ячейке $p = \sum_1^q \Theta(u_{n+1} - u_n)$ (здесь Θ – функция Хевисайда, $\Theta = +1$ для $x \geq 0$ и $\Theta = 0$ для $x < 0$). Численные результаты наводят на мысль, что модель (3.122) представляет дьявольскую (канторовскую) лестницу, хотя строгое доказательство этого утверждения не возможно в рамках алгоритма эффективного потенциала. Во-вторых, фаза, соответствующая отношению $\nu = (p+r)/(q+s)$, всегда находится между фазами p/q и r/s при достаточно малых значениях K . Следовательно, существует бесконечное число фаз между двумя любыми взятыми фазами (включая несоизмеримые фазы, которые характеризуются иррациональными значениями числа ν).

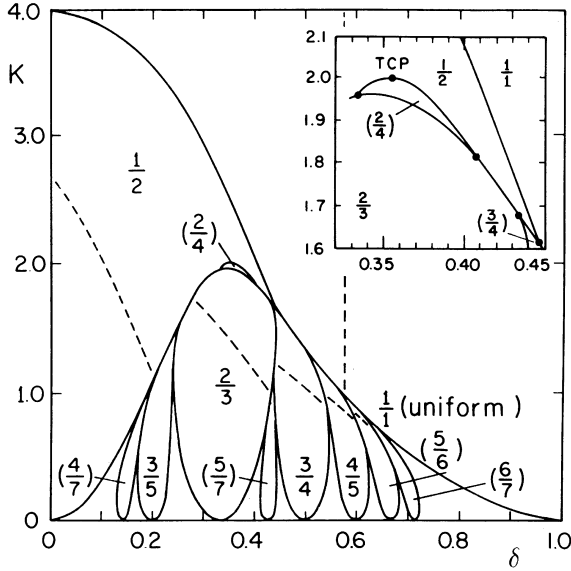


Рис. 3.19. Фазовая диаграмма модели (3.122). Числа p/q характеризуют тип и структуру модулированных фаз. Непронуемые области содержат дополнительные соизмеримые фазы. Во вставке показана тройная критическая точка [280].

При адиабатическом изменении параметров системы, т. е. δ или K в уравнении (3.122), должны происходить фазовые переходы между различными фазами. Численное моделирование [278, 280] показало, что переход между однородной (1/1) и любой модулированной (p/q с $q > 1$) фазой обычно является непрерывным (второго порядка) фонон-стимулированным переходом. С другой стороны переходы между модулированными основными состояниями, такими как $\frac{1}{2} \rightarrow \frac{2}{3}$, $\frac{1}{2} \rightarrow \frac{3}{4}$, $\frac{2}{3} \rightarrow \frac{3}{4}$ и т.д., обычно являются переходами первого порядка и происходят через рождение дефектов типа кинка с последующим образованием ядер дефектов.

Стоит отметить работу Бирна и Миллера [279] которые рассмотрели модель ФК с невыпуклыми потенциалом Леннарда-Джонса и двухъямным потенциалом межатомного взаимодействия, а также исследования Такено и Хомма [281] и Йокой с соавторами [282], где был проанализирован синусоидальный межатомный потенциал. Мариан и Бишоп [283] исследовали модель ФК, в которой дополнительно к двухъямному межатомному взаимодействию с $a_* = a_s$ учтено взаимодействие следующих ближайших соседей, так что гамильтониан системы имеет вид

$$H = \sum_n \left[\frac{1}{2} \left(\frac{du_n}{dt} \right)^2 + (1 - \cos u_n) + \frac{1}{2} V_m \beta^4 (u_{n+1} - u_n)^4 - V_m \beta^2 (u_{n+1} - u_n)^2 + \frac{\gamma}{2} (u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n)^2 \right]. \quad (3.123)$$

Модель (3.123) может быть полезна при описании двойникования в мартенситных материалах [284, 285]. Для того чтобы применить метод эффективного потенциала Мариан и Флория [278] преобразовали гамильтониан (3.123) в форму, содержащую только взаимодействие ближайших соседей, но с векторными переменными, определенными как $v_n \equiv \{u_{2n}, u_{2n+1}\}$. В результате этого, эффективный потенциал $\tilde{V}(v_n)$ становится двухмерным. Вычисленная фазовая диаграмма состоит из различных модулированных соизмеримых и несоизмеримых структур ОС.

Давайте теперь коротко обсудим спектр возбуждений модулированных ОС. Сперва мы должны заметить, что ОС со сложной элементарной ячейкой (т. е. с $q > 1$) может иметь больше чем одну фононную ветвь. Во-вторых, модулированное ОС с периодом $a = qa_s$ является q -кратно вырожденным, так как сдвиг всех атомов в цепи на расстояние, кратное периоду подложки $\Delta x = ja_s$, $j = 1, \dots, q-1$, будет переводить ОС в неэквивалентное состояние. Таким образом, эта ситуация вполне подобна той, которая возникает в случае многоямного потенциала подложки (см. выше параграф 3.3.4). Стандартный 2π -кинк расщепляется на q независимых подкинков с отталкивающими взаимодействиями между ними. Один из этих подкинков

(конкретно, наибольший) является подобным СГ кинку, который описывает конфигурацию, в которой атомы занимают соседние минимумы потенциала подложки. Остальные $(q - 1)$ подкинков ограничены некоторой элементарной ячейкой подложки. Иногда их называют "внутренними кинками" или "доменными стенками". Заметим, однако, что все типы подкинков топологически устойчивы. Конечно, сами подкинки и их взаимодействия должны подчиняться некоторым топологическим ограничениям.

Понятно, что динамика кинков в случае модулированного ОС намного сложнее их динамики в стандартной модели ФК. В качестве простейшего примера давайте, следуя работе Мариана с соавторами [286], рассмотрим модель ФК с двухъямным межатомным потенциалом (3.100) (с $a_* = a_s$ или $\delta = 0$). Как показано на рис. 3.19, ОС цепи димеризовано если $V_m\beta^2 > 1/8$, т. е. если $V_{\text{int}}''(a_s) \leq -1/4$. Это ОС является двукратно вырожденным. Первое состояние описывается конфигурацией с чередующимися длинами пружин "короткая-длинная", для которой координаты атомов $x_n = na_s + u_n$, $u_n = (-1)^n b$, где $b \approx (1/2\beta)(1 - 1/8V_m\beta^2)^{1/2}$ для $\beta \gg 1$. Второе ОС соответствует конфигурации с длинами пружин "длинная-короткая" с координатами $u_n = (-1)^{n+1}b$. Для того чтобы рассмотреть подкинк ("внутренний" кинк), связывающий эти два ОС, мы введем безразмерную переменную $v_n = (-1)^n u_n / b$ и воспользуемся континуальным приближением $v_n \rightarrow v(x)$ и $v_{n\pm 1} \rightarrow v \pm a_s v_x$, в котором гамильтониан сводится к форме [286]

$$H \approx b^2 \int \frac{dx}{a_s} \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial t} \right)^2 + \frac{1}{2} C(v) \left(\frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 + A (v^2 - 1)^2 \right\}, \quad (3.124)$$

где

$$A = 2 \left(V_m\beta^2 - \frac{1}{8} \right) \quad \text{и} \quad C(v) = 2V_m\beta^2 \left[1 - 3v^2 \left(1 - \frac{1}{8V_m\beta^2} \right) \right].$$

Гамильтониан (3.124) соответствует модели ϕ^4 с эффективной постоянной пружины $C(v)$, зависящей от переменной $v(x, t)$. Кинк модели ϕ^4 (3.124) $v(x) \propto \tanh(x/d_{\text{eff}})$ имеет эффективную ширину

$$d_{\text{eff}} = b\sqrt{2} \left(\frac{1 - 12b^2\beta^2}{1 - 1/8V_m\beta^2} \right)^{1/2}. \quad (3.125)$$

Ширина кинка становится бесконечной при $V_m\beta^2 \rightarrow 1/8$ (когда исчезает димеризация ОС), и она становится нулевой при $b \rightarrow 1/2\beta\sqrt{3}$ или при $V_m\beta^2 \rightarrow \frac{1}{8} + \frac{1}{16} = \frac{3}{16}$. Последний случай является подобным случаю антикинка в модели ФК с экспоненциальным межатомным взаимодействием, когда параметр нелинейности α не превышает критического значения α_{cr} (см. параграф 3.5.1). Аналогично этому случаю, континуальное приближение здесь тоже становится недопустимым и для $V_m\beta^2 \geq 3/16$ подкинк будет пинингован на потенциале подложки.

Общий метод анализа кинков, возбужденных на модулированном ОС, требует прямолинейных, но достаточно длинных вычислений. Поэтому здесь мы приведем только основную идею этого подхода, не входя в обсуждение специфических деталей. Координаты атомов задаются соотношением

$$x_n = na_s + X_n + u_n, \quad (3.126)$$

где X_n соответствует координате кинка (для случая межфазной границы $X_n = 0$) и u_n ($|u_n| < a_s/2$) описывает модуляцию ОС. Смещения u_n разложим в ряды Фурье

$$u_n(t) = v_n(t)e^{iQn} + v_n^*(t)e^{-iQn} + \text{h.h.}, \quad (3.127)$$

где h.h. – обозначение для высших гармоник с некоторым волновым числом $Q = 2\pi p/q$ (p и q – целые числа), характеризующим модулированное ОС. (Заметим, что если мы в уравнении (3.127) ограничимся только первыми гармоническими членами, то приближенное основное состояние может оказаться бесконечно вырожденным для $q > 2$ и соответствующие кинки не будут топологически устойчивы). Затем выражения (3.126) и (3.127) подставим в гамильтониан модели. Периодический потенциал подложки примет форму

$$V_{\text{sub}}(x_n) = 1 - \cos u_n \cos X_n + \sin u_n \sin X_n, \quad (3.128)$$

где функции $\cos u_n$ и $\sin u_n$ раскладываются в ряды Тейлора по малым u_n . Получающийся в результате этого гамильтониан можно рассмотреть в континуальном приближении в рамках прямого подхода используя, например, методы, описанные детально Слотом и Энсенем [57, 287] для frustrated ϕ^4 -model. А именно, допуская, что переменные X_n и v_n медленно меняются на шкале порядка шага решетки a_s , мы можем использовать континуальные приближения $na_s \rightarrow x$, $S_n \rightarrow S(x, t)$, $S_{n\pm 1} \rightarrow S \pm a_s S_x$, где $S \sim \mathcal{O}(1)$, $S_x = \partial S / \partial x \sim \mathcal{O}(\epsilon)$, $S_x^2, S_{xx} \sim \mathcal{O}(\epsilon^2)$, и т. д. с $\epsilon \ll 1$, где S_n обозначает X_n или v_n . Подставляя эти выражения в гамильтониан, опуская быстро меняющиеся члены и делая некоторые преобразования, мы можем получить приближенный гамильтониан, дающий эффективное уравнение движения, которое должно быть решено вместе с соответствующими граничными

условиями. Однако описанная выше процедура довольно трудоёмка, так что более простым обычно является прямое численное моделирование дискретной ФК модели.

В заключение этого раздела мы хотели бы напомнить, что ФК модель с межатомными потенциалами Морса или Леннарда-Джонса имеют в действительности *три* характерные длины a_s , a_i , и a_0 . Дополнительная пространственная шкала a_0 соответствует минимуму потенциала взаимодействия. Для использованных выше граничных условий (то есть для фиксированных на бесконечности концов цепи) этот факт не изменяет результаты при $a_0 \geq a_{FM}$, где величина a_{FM} ($a_{FM} < a_s$), введенная Франком и Ван дер Мерве [31, 32], описывает ситуацию, когда основное состояние цепи со *свободными* концами содержит кинки с конечной плотностью. Для $a_0 < a_{FM}$ бесконечная цепь (с закрепленными концами) будет разрываться на две полу-бесконечные цепи, так как это приводит к уменьшению энергии системы в случае, когда $V_{\text{int}}(x) \rightarrow 0$ при $x \rightarrow \infty$. Однако, такой разрыв не связан с “дополнительными” антикинками, как в случае проанализированном ранее.

3.5.3 Взаимодействие Кац-Бакера

Теперь мы расширим классическую модель ФК, предположив что в цепи взаимодействуют не только ближайшие соседние атомы. Мы рассмотрим потенциал взаимодействия $V_{\text{int}}(x)$, который остается выпуклым и достаточно быстро падает при $|x| \rightarrow \infty$ (например, как в случае экспоненциально убывающего потенциала). В действительности, динамика модели ФК в этом случае подобна динамике для модели, в которой взаимодействуют только ближайшие соседи, но она характеризуется *перенормированным* параметром взаимодействия

$$g \rightarrow g_{\text{eff}} = \sum_{j=1}^{\infty} j^2 V_{\text{int}}''(ja_s). \quad (3.129)$$

В качестве примера, мы возьмем экспоненциальное взаимодействие (3.97), для которого уравнение (3.129) принимает вид

$$g_{\text{eff}} = g \frac{(1+S)}{(1-S)^3}, \quad (3.130)$$

где параметр $g = V_0 \beta^2$ был определен ранее, а параметр

$$S = e^{-\beta a_s}. \quad (3.131)$$

Для дальнегодействующего межатомного потенциала, когда $\beta a_s \ll 1$, из уравнения (3.130) следует, что

$$g_{\text{eff}} \approx \frac{2g}{(\beta a_s)^3} \gg g. \quad (3.132)$$

Для экспоненциального межатомного потенциала упомянутый выше результат может быть получен более простым путем с помощью метода, впервые предложенного Саркером и Крумханслом [288] (см. также ссылки [165],[289]–[291]). Следуя этой процедуре, разложим потенциалы взаимодействия (3.97) в ряд Тейлора, сохраняя кубические члены для взаимодействия ближайших соседей и квадратные члены для взаимодействия остальных атомов. В этом случае энергия взаимодействия будет иметь вид

$$H_{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{\text{int}}(x_i - x_j) \approx \frac{A}{6} \sum_i (u_i - u_{i-1})^3 + J \frac{(1-S)}{4S} \sum_{i \neq j} S^{|i-j|} (u_i - u_j)^2, \quad (3.133)$$

где мы ввели следующие обозначения: $A = \alpha(d/a_s)^3$, $J = (d/a_s)^2/(1-S)$, а параметры $d = a_s \sqrt{g}$ и $\alpha = -\beta a_s/d$ были уже введены ранее. Таким образом, гамильтониан (3.133) описывает одномерную цепочку атомов, взаимодействие которых описывается парными потенциалами формы Кац-Бакера [292, 293]. Гамильтониану (3.133) соответствует система уравнений движения

$$\frac{d^2 u_i}{dt^2} + \sin u_i + \frac{1}{2} A [(u_i - u_{i-1})^2 - (u_{i+1} - u_i)^2] + 2J u_i = L_i, \quad (3.134)$$

где вспомогательная величина

$$L_i = J \frac{(1-S)}{S} \sum_{j=-\infty(j \neq 0)}^{+\infty} S^{|j|} u_{i+j} \quad (3.135)$$

удовлетворяет следующим рекуррентному соотношению [288],

$$\left(S + \frac{1}{S}\right) L_i = L_{i+1} + L_{i-1} + J \frac{(1-S)}{S} (u_{i+1} + u_{i-1} - 2S u_i), \quad (3.136)$$

которое позволяет свести уравнения (3.134) – (3.136) к некоторой эффективной задаче, включающей только взаимодействие ближайших соседних атомов.

В континуальном приближении уравнения (3.134) – (3.136) могут быть представлены в форме

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - d_{\text{eff}}^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \sin u - \alpha d^3 \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{a_s^2 S}{(1-S)^2} f(u), \quad (3.137)$$

где

$$f(u) = \frac{\partial^4 u}{\partial^2 x \partial t^2} - \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 \sin u - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} (1 - \cos u) \quad (3.138)$$

и

$$d_{\text{eff}}^2 \equiv d^2 \frac{(1+S+S/J)}{(1-S)^3}. \quad (3.139)$$

Введя безразмерную координату $x \rightarrow x/d_{\text{eff}}$, мы получим уравнение

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \left(1 + \alpha_{\text{eff}} \frac{\partial u}{\partial x} \right) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \sin u = \epsilon f(u), \quad (3.140)$$

где

$$\alpha_{\text{eff}} \equiv \alpha \left(\frac{d}{d_{\text{eff}}} \right)^3 \quad \text{and} \quad \epsilon = \frac{S}{S + J(1+S)}. \quad (3.141)$$

В случае $d \gg a_s$ мы будем иметь $J \gg 1$ и $\epsilon \ll 1$; поэтому, возмущение $\epsilon f(u)$ в уравнение (3.140) может быть опущено. Следовательно, дальнodelствующее экспоненциальное межатомное взаимодействие, по сравнению с рассмотренными ранее короткодeйствующими взаимодействиями, проявляется только как эффективное перенормирование параметров кинка, например ширина кинка увеличивается ($d \rightarrow d_{\text{eff}} > d$), в то время как соответствующий параметр нелинейности уменьшается ($\alpha \rightarrow \alpha_{\text{eff}} < \alpha$). Мы здесь хотим также отметить, что взаимодействие между двумя кинками всегда является более протяженным, чем прямое взаимодействие между двумя атомами благодаря потенциалу (3.97), так как $d_{\text{eff}}^{-1} \approx \beta(\beta_s/2g)^{1/2} \ll \beta$ для $\beta a_s \ll 1$ и $g \gg 1$.

Когда межатомное взаимодействие становится протяженным целой цепи, т.е. если $\beta \rightarrow 0$ так что $S \rightarrow 1$, то эффективная ширина кинка согласно уравнению (3.130) бесконечно увеличивается. Следовательно, в этом пределе барьер Пайерса-Набарро должен исчезать. Однако, Мингалеев и др. [294] показали, что это верно только в случае $J > 1/2$. Используя технику псевдо-дифференциальных операторов (см., например, уравнения (3.108)–(3.111) в предыдущем параграфе 3.5.1; фактически, эта техника эквивалентна подходу Розенау [7] детально описанному в параграфе 1.1). Мингалеев и др. [294] изучили модель (3.133) для случая $A = 0$, т.е. в случае, когда игнорируется ангармоничность взаимодействия, и нашли неявную аналитическую форму кинка и формулу для его энергии в континуальном приближении. Они показали, что для малых значений параметра J , $J < J_c \equiv S/(S+1)$, кинк становится “S-профильным” (многозначным), т.е. наклон профиля кинка в его центре становится вертикальным при $J = J_c$, а при меньших значениях J он имеет конечное положительное значение. Это означает, что континуальное приближение становится недопустимым при $J \leq J_c$. Аналогично примеру ангармонического взаимодействия, описанного ранее в параграфе 3.5, в этом случае ширина кинка становится меньше шага решетки [см. уравнение (3.139)], так что такой кинк может быть назван “существенно локализованным”. Барьер ПН, однако, остается конечным даже в пределе $\beta \rightarrow 0$ если $J < J_c$. Интересно отметить, что если проигнорировать нефизическую часть S-кинка и заменить ее вертикальным наклоном, то результирующая форма кинка хорошо согласуется с формой, полученной численно для дискретной цепи, если параметр β достаточно мал. Действительно, в этом случае кинк является почти точно-подобным объектом и состоит только из своих хвостов, которые хорошо описываются с помощью континуального приближения.

Другой интересный эффект, найденный Мингалеевым и др. [294], состоит в том, что дальнodelствующее межатомное взаимодействие сильно усиливает появление кинковых профильных мод (см. параграф 3.3.2) при малых значениях β . Например, в то время как стандартная ($\beta = \infty$) модель ФК демонстрирует существование только одной профильной моды для узкого интервала значений параметра J , около $J \approx 0.5$, дальнodelствующее взаимодействие с, например, показателем $\beta = 0.2\pi$ дает семь внутренних локализованных мод, и их число бесконечно растет в пределе $\alpha \rightarrow 0$. Наконец, Мингалеев и др. [294] отметили, что вследствие нарушения инвариантности Лоренца в модели с ангармоническим взаимодействием *движущийся* кинк должен излучать фононы с волновым вектором, пропорциональным скорости кинка, даже в пределе континуального приближения, когда игнорируются эффекты дискретности и ПН потенциал отсутствует.

И последнее, из уравнений (3.137) – (3.139) следует, что дальнodelствующий характер межатомного взаимодействия изменяет у фононов дисперсионное соотношение. Действительно, для волновых чисел $|\kappa| \ll \pi$ дисперсионное отношение можно получить в следующей форме

$$\omega_{\text{ph}}^2(\kappa) = \frac{\omega_{\text{min}}^2 + g_{\text{eff}} \kappa^2}{1 + S(1-S)^{-2} \kappa^2}, \quad (3.142)$$

где $g_{\text{eff}} = (d_{\text{eff}}/a_s)^2$ и $\omega_{\text{min}} = 1$. Мы также хотим отметить, что модель двойной СГ с взаимодействием Кац-Бакера была изучена Кройтори [290] с качественно подобными результатами.

3.5.4 Дальнодействующее взаимодействие

Обсуждаемые выше потенциалы позволяют свести уравнение движения в пределе континуального приближения к уравнению СГ-типа с локальным взаимодействием. В противоположность этому случаю уравнение движения для модели ФК со степенным межатомным взаимодействием

$$V_{\text{int}}(x) = V_0 \left(\frac{a_s}{x} \right)^n \quad (3.143)$$

может быть сведено к *нелокальному интегро-дифференциальному* СГ уравнению [34, 165, 295]. Для того чтобы получить такое уравнение, воспользуемся континуальным приближением: $j \rightarrow y = ja_s$, $\sum_j \rightarrow \int dy/a_s$, и сделаем замену переменной $y \rightarrow x = y + u(y)$, так что приблизительно, $dx = (1 + u_y) dy \approx (1 + u_x) dy$ и $dy \approx (1 - u_x) dx$. Тогда энергия взаимодействия будет иметь вид

$$H_{\text{int}} = \frac{1}{a_s^2} \iint dx dx' \frac{\partial u(x)}{\partial x} \frac{\partial u(x')}{\partial x'} V_{\text{int}}(x - x'). \quad (3.144)$$

Получившиеся формула (3.144) имеет простой физический смысл, так как величина $\rho(x) \equiv -u_x(x)/a_s$ является плотностью избыточных атомов (относительно начальной соразмерной структуры). Для локального потенциала взаимодействия атомов

$$V_{\text{int}}(x) = a \delta(x) d^2 \quad (3.145)$$

уравнение (3.144) будет иметь вид стандартного уравнения СГ. Для нелокального потенциала (3.143) интеграл (3.144) расходится при $(x - x') \rightarrow 0$ и из-за этого нужно делать обрезание интервала интегрирования на некотором расстоянии $a^* \approx a_s$ [165]. Введя безразмерные переменные, мы получим гамильтониан для нелокальной модели СГ

$$H = H_{\text{local}} + \frac{A}{2\delta} \int dx \frac{\partial u}{\partial x} \int_{\delta}^{\infty} \frac{dx'}{(x')^n} \left[\frac{\partial u}{\partial x}(x + x') + \frac{\partial u}{\partial x}(x - x') \right], \quad (3.146)$$

где $\delta = a_s/d$, $A = V_0 \delta^{n+1}/(2\pi)^2$. Если потенциал $V_{\text{int}}(x)$ является короткодействующим, то, без последнего члена в уравнении (3.146), выражение для энергии примет форму, соответствующую модели СГ, для которой $d^2 = a_s^2 V_{\text{int}}''(a_s) = V_0 n(n+1)$. Мы используем это соотношение с целью уменьшения числа независимых параметров и представления параметра V_0 потенциала (3.143) в терминах параметра d . В результате мы получим $A = V_0 \delta^{n-1}/n(n+1)$ и гамильтониан (3.146) будет функцией только двух параметров δ и n . Уравнение движения, соответствующее гамильтониану (3.146), имеет форму

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + V'_{\text{sub}}(u) = A \frac{\partial}{\partial x} \int_{\delta}^{\infty} \frac{dx'}{(x')^n} [u_x(x + x') + u_x(x - x')], \quad (3.147)$$

и оно описывает динамику цепи с нелокальным взаимодействием.

Из уравнения (3.147) можно увидеть, что структура ядра кинка (т.е. его форма при $|x - X| < d$) определяется, главным образом, локальными членами уравнения движения [295]. Следовательно, “локальные” характеристики кинка, такие как его эффективная масса или амплитуда ПН потенциала, не должны существенно отличаться от значений, вычисленных для локальной модели ФК с перенормированной постоянной упругости $g_{\text{eff}} = \sum_{j=1}^{\infty} V_{\text{int}}''(ja_s) = gS_{n+2}$, $g = n(n+1)V_0/a_s^2$, где $S_m = \sum_{j=1}^{\infty} j^{-m}$ (например, $S_3 \approx 1.202$, $S_5 \approx 1.037$), и ангармоничностью взаимодействия, задаваемой параметром

$$\alpha_{\text{eff}} = \alpha S_{n+2}^{-3/2}, \quad \alpha = -(n+2)/d. \quad (3.148)$$

Действительно, зависимости $E_{PN}(l)$ и $m(l)$ (где $l \equiv \pi\sqrt{g}$) вычисленные Брауном и др. [165] для кулоновского ($n = 1$) и диполь-дипольного ($n = 3$) взаимодействия атомов, показанные на рис. 3.20, качественно подобны зависимостям на рис. 3.16, полученным для модели ФК с локальным ангармоническим взаимодействием. Отличие между параметрами E_{PN} и m для кинка и антикинка при одинаковом значении параметра g намного больше для дипольного взаимодействия, чем для кулоновского взаимодействия, что, согласно уравнению (3.148), объясняется большей нелинейностью дипольного потенциала. Заметим, что амплитуда ПН потенциала для модели ФК с кулоновским взаимодействием ($n = 1$) при тех же самых значениях системных параметров была вычислена Вонгом и Пикетом [296]. Браун и др. [165] вычислили также параметры кинка для степенной модели ФК с несинусоидальным потенциалом подложки. Зависимости (см. рис. 3.21) подобны аналогичным зависимостям для локальной модели ФК, описанной в параграфе 3.3.2.

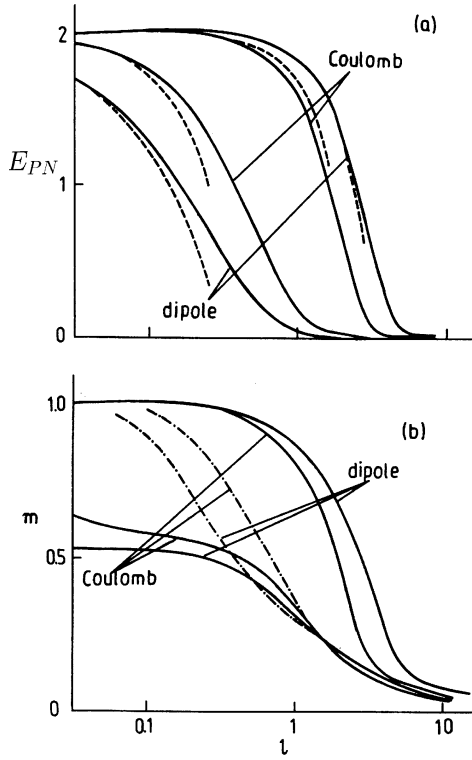


Рис. 3.20. (а) Зависимости энергии ПН $E_{PN}(l)$ и (б) эффективной массы $m(l)$ для кинка и антикинка в случае кулоновского и диполь-дипольного взаимодействия. Параметр $l = \frac{1}{2}\sqrt{V_0 n(n+1)}$ для $n = 1$ или 3 определяется шириной кинка d . Пунктирные кривые показывают аналитические асимптотики [165].

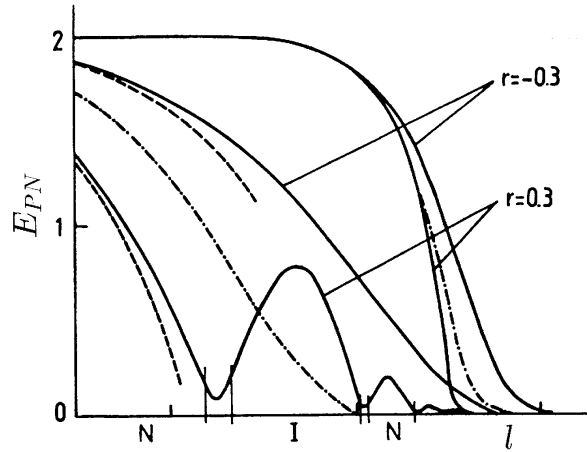


Рис. 3.21. Зависимость энергии ПН $E_{PN}(l)$, где $l = \sqrt{3V_0}$, для дипольного отталкивания атомов в случае несинусоидального потенциала подложки (3.59) для $s = -r = \pm 0.3$. Для сравнения, пунктирно-точечные кривые показывают характеристики кинка для синусоидального потенциала. Пунктирные линии показывают результат приближения слабой связи. Области нормального и обратного ПН рельефа обозначены буквами N и I, соответственно [165].

Не смотря на то, что локальные характеристики кинка подобны характеристикам для классической модели ФК, асимптотики кинка уравнения (3.147), которые определяются последним членом, сильно отличаются от асимптотик СГ кинка. Они имеют степенной характер [34, 295]. Действительно, лианеризуя уравнение (3.147) вблизи асимптотического значения $u(\infty)$ и интегрируя по частям, мы получим

$$|u(x) - u(\infty)| \approx \frac{2\pi n A}{\omega_{\min}^2 |x|^{n+1}}, \quad x \rightarrow \pm\infty, \quad (3.149)$$

где $\omega_{\min}^2 = V_{\text{sub}}''(0)$. Ясно, что для межатомных сил, подчиняющихся степенному закону, взаимодействие между кинками (т.е., между “избыточными” атомами или вакансиями в цепи) должно тоже подчиняться степенному закону. Это было показано Косевичем и Ковалевым [34] для краудионов в объеме кристалла, Гордоном и Виланом [297], Люксютовым [298] и Талаповым [299] для упругого взаимодействия атомов, адсорбированных на поверхности кристалла, а Халдане и Виланом [300] и Покровским и Вирочекком [295] для диполь-дипольного взаимодействия адатомов. Для того чтобы показать это непосредственно, давайте рассмотрим цепочку с двумя

кинками, имеющими топологические заряды σ_1 и σ_2 , которые отделены друг от друга некоторым расстоянием x_0 . В нулевом приближении, решение уравнения (3.147) можно представить как суперпозицию двух СГ кинков

$$u(x, t) = u_k^{SG} \left(x - \frac{1}{2}x_0 \right) + u_k^{SG} \left(x + \frac{1}{2}x_0 \right). \quad (3.150)$$

В рамках адиабатической теории возмущения [27] изменение относительной координаты x_0 в силу взаимодействия кинков дается (для больших значений x_0) следующим уравнением [165]

$$\frac{d^2 x_0}{dt^2} = (2\pi)^2 n A \frac{\sigma_1 \sigma_2}{x_0^{n+1}}, \quad (3.151)$$

которое сводит задачу к движению эффективной частицы в потенциале

$$V_{\text{int}}^{(0)}(x_0) = \frac{(2\pi)^2 A \sigma_1 \sigma_2}{x_0^n}. \quad (3.152)$$

Интересно отметить, что после обратного введения размерных переменных мы найдем, что полученный выше закон взаимодействия является ничем иным как взаимодействием двух “избыточных” атомов (или вакансий) в цепи. Такой вклад во взаимодействие кинков отсутствует в стандартной модели ФК, где учитываются силы взаимодействия только ближайших соседей, т.е. для классической модели ФК мы всегда будем иметь $V_{\text{int}}^{(0)} \equiv 0$. В локальной модели ФК, однако, взаимодействие кинков происходит вследствие перекрытия их хвостов, и такое перекрытие дает энергию взаимодействия $V_{\text{int}}^{(\text{loc})}(x) \propto u_x(x)$, которая пропорциональна плотности “избыточных” атомов. Конечно, такой же эффект будет также давать вклад в энергию взаимодействия кинков и для сил, подчиняющихся степенному закону. Однако в этом случае этот вклад будет *малым* по сравнению с основным взаимодействием, описываемым уравнением (3.152), т.е. $V_{\text{int}}^{(\text{loc})} \propto x^{-(n+2)}$. Действительно, как следует из численного моделирования Брауна и др. [165], в случае дипольного взаимодействия результат $V_{\text{int}}^{(\text{loc})}(x) \propto x^{-5}$ хорошо согласуется с численными данными.

Фононный спектр нелокальной модели ФК описывается выражением

$$\omega_{\text{ph}}^2(k) = \omega_{\text{min}}^2 + 2g \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1 - \cos(\kappa j)}{j^{n+2}}, \quad (3.153)$$

которое является подобным дисперсионному отношению локальной модели ФК. Однако, как будет показано в главе 4, параметры бризерных возбуждений значительно отличаются от параметров локальной модели ФК.

Недавно, нелокальное уравнение СГ формы

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \sin u = \frac{\partial}{\partial x} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' G(x - x') \frac{\partial u}{\partial x'}(x', t), \quad (3.154)$$

с экспоненциальным ядром $G(x) = (2\lambda)^{-1} \exp(-|x|/\lambda)$, ядро Макдональда, $G(x) = (\pi\lambda)^{-1} K_0(|x|/\lambda)$ было получено с целью описания нелокальных эффектов в электродинамике длинных джозефсоновских контактов [301]. Для этого типа нелокальных моделей было показано, что нелокальное уравнение СГ (3.154) с экспоненциальным взаимодействием не допускает никаких *движущихся* 2π -кинков, но вместо этого оно допускает движущиеся 4π -, 6π -, и т.д. кинки. Однако, эти сложные кинки могут двигаться только с некоторыми определенными скоростями [183, 302].

3.5.5 Компактоны-кинки

Если взаимодействие в цепи ФК является чисто *нелинейным* и линейное взаимодействие отсутствует, то кинки могут быть локализованы на конечном интервале, который характеризуется отсутствием экспоненциально убывающих хвостов. Этот эффект обусловлен только нелинейной дисперсией. Такой тип уединенных волн с компактным носителем обычно называют *компактонами*, они впервые были исследованы для обобщенного уравнения Кортевега-де Фриза с чисто нелинейной дисперсией [303].

Кившарь [305] сообщил, что внутренние локализованные моды в чисто ангармонических решетках могут демонстрировать компактоно-подобные свойства. Позже Дюсель и соавторы [30] показали, что такая же феноменология может также появляться в Клейн-Гордоновских системах с ангармоническим взаимодействием, они получили экспериментальное доказательство существования стационарных компактонов в реальной физической системе, сделанной из одинаковых маятников, связанных пружинами. Недавно, решение в виде темного компактона было найдено в модели экситонов Френкеля [304].

Для того чтобы описать кинк на компактном носителе, мы рассмотрим ангармоническое взаимодействие в модели ФК, записанной в стандартной форме

$$\frac{d^2 u_n}{dt^2} - [V'_{\text{int}}(u_{n+1} - u_n) - V'_{\text{int}}(u_{n-1} - u_n)] + V'_{\text{sub}}(u_n) = 0, \quad (3.155)$$

и предположим, что энергия межчастичного взаимодействия имеет форму

$$V_{\text{int}}(u_{n+1} - u_n) = \frac{c_1}{2}(u_{n+1} - u_n)^2 + \frac{c_{\text{nl}}}{4}(u_{n+1} - u_n)^4. \quad (3.156)$$

Здесь, параметры c_1 и c_{nl} контролируют интенсивность линейного и нелинейного взаимодействий, соответственно.

В континуальном пределе, соответствующее уравнение будет иметь форму

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \left[c_1 + 3c_{\text{nl}} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 \right] \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - V'_{\text{sub}}(u) = 0, \quad (3.157)$$

где мы опустили члены с производными высоких порядков, предположив что $c_{\text{nl}}(u_x)^2 u_{xx} \gg c_1 u_{xxxx}$. Высматривая локализованные решения со стационарной формой,двигающиеся со скоростью v , мы найдем, что эффективная линейная дисперсия исчезает в двух случаях, а именно когда (i) $c_1 = 0$, $v = 0$ и (ii) $c_1 \neq 0$, $v = \pm\sqrt{c_1}$, которые соответствуют кинку с компактным носителем. В случае нормализованного синусоидального потенциала подложки $V_{\text{sub}}(u) = (1/2)[1 + \cos(\pi u)]$, стационарный компактный кинк может быть найден в аналитической форме как решение, состоящее из четырех кусков

$$u_k(x) = \pm \frac{2}{\pi} \cos^{-1} \left\{ \text{cn}^2 \left[\frac{\pi}{2\alpha^{1/4}}(x - x_0), k \right] \right\}, \quad (3.158)$$

для $|x - x_0| < 1$ и $u = \pm 1$ для остальных значений. В уравнении (3.158) $\alpha = 3c_{\text{nl}}$, знаки “+” и “-” соответствуют полуосям $x \geq x_0$ и $x \leq x_0$, соответственно, а cn – эллиптическая функция Якоби с модулем k . Такое же решение может быть найдено для движущегося компактона с фиксированным значением скорости, когда $c_1 \neq 0$. Это решение можно получить из стационарного компактона, сделав замену переменной $x \rightarrow (x \pm \sqrt{c_1} t)$.

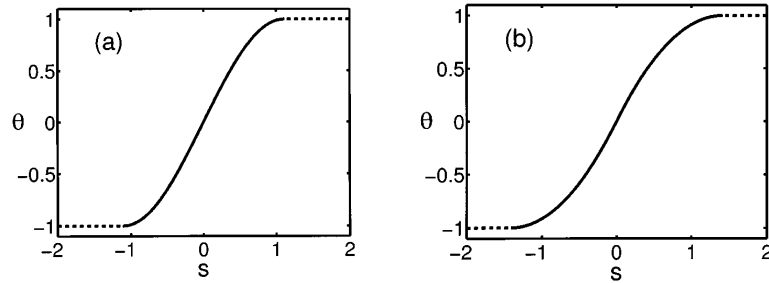


Рис. 3.22. Нормализованные компактоны для двух типов потенциала подложки: (а) потенциал ϕ^4 и (б) синусоидальный потенциал. Для каждого потенциала S-образная волновая кривая представляет компактную часть, которая связывает две постоянных части решения, показанные горизонтальными точечными линиями [30].

Решение (3.158) описывает топологический компактон, являющийся обобщением начальной концепции, предложенной для уравнения Кортевега-де Фриза с нелинейной дисперсией. Его форма состоит из двух кусков эллиптической функции, которые связывают две прямые линии $u = \pm 1$. Более того, концепция кинка компактона может быть обобщена на любые типы модели Клейна-Гордона и потенциал подложки $V_{\text{sub}}(u)$. Для них можно также найти точное аналитическое решение. Дюсель и соавторы [30] привели точное решение для ϕ^4 , двуквадратичной и СГ моделей. Рисунок 3.22 демонстрирует два примера кинка компактона для ϕ^4 и синусоидального потенциалов, соответственно.

Дюсель с соавторами [30] исследовали численно устойчивость кинковых компактонов относительно движения и внешнего шума. Они нашли, что стационарный кинковый компактон устойчив, в то время как компактон, движущийся со скоростью $v = \sqrt{c_1}$ – неустойчив. Они также сконструировали механический аналог нелинейной цепи с двухъямным потенциалом – экспериментальную решетку связанных маятников. Регулируя напряжение металлических полос, Дюсель с соавторами [30] смогли сделать линейное взаимодействие почти отсутствующим. Это позволило им получить профиль, очень близкий по форме к стационарному кинку-компактону. Для движущегося компактона, формально существующего в модели как с линейной так и нелинейной дисперсиями,

было показано путем численного моделирования, что он переходит в обычный кинк после испускания небольшого количества излучения.

Динда с соавторами [306] проанализировали возможность существования у кинков с компактоноподобным профилем устойчивого баллистического движения в дискретной цепи с потенциалом подложки ϕ^4 и ангармоническим взаимодействием. Они показали, что эффекты дискретности решетки и наличие линейного взаимодействия между ячейками решетки препятствуют устойчивому баллистическому движению компактона, так как в силу специфической структуры мало-амплитудного частотного спектра компактона, его низкочастотные внутренние моды входят в прямой резонанс с фононными модами. Эти исследования открыли области параметров, для которых возможно баллистическое движение компактоно-подобных кинков и показали характер взаимодействий между такими кинками. Из моделирования следует, что столкновения между кинковыми компактоном и анти-компактоном, двигающимися на низких встречных скоростях, всегда приводит к образованию их долгоживущего связанного состояния, подобно столкновению кинка и антикинка в цепи ϕ^4 . Однако Динда и др. [306] нашли, что столкновения между компактонами никогда не приводит к отражению, при любой скорости их сближения, даже если скорости их встречного движения различны, или компактоны имеют разные диаметры. Таким образом, при столкновении вся энергия движения компактонов преобразуется в их внутренние моды.

Бризеры

В этой главе мы опишем свойства бризеров в модели ФК. Вначале, мы обсудим бризеры в слабо дискретной модели СГ, в которой дискретность может быть рассмотрена как малое возмущение. В этом случае одним из замечательных свойств, обусловленных много-солитонными эффектами, является фрактальное солитонное рассеяние. Затем мы рассмотрим нелинейные моды локализованные на примесях – нелинейные примесные моды. В заключение, мы опишем случай сильно локализованных дискретных мод — дискретных бризеров.

4.1 Возмущенные бризеры уравнения синус-Гордон

Даже слабая дискретность не позволяет осциллирующим бризерам существовать как динамическим нелинейным модам цепочки. Слабая дискретность действует как внешнее возмущение, которое нарушает точную интегрируемость СГ модели. В результате этого бризеры излучают линейные волны и медленно затухают. Однако, для цепочек с сильным межчастичным взаимодействием, динамика бризеров может быть рассмотрена в рамках возмущенного уравнения СГ, которое учитывает эффекты, обусловленные дискретностью. Тогда, динамика бризеров и их время жизни будут зависеть от начальной энергии и эти величины будут различны для бризеров с малыми и большими амплитудами [307]. Фактически, во многих неинтегрируемых моделях бризеры являются долгоживущими нелинейными возбуждениями, которые играют важную роль в многих физических процессах, таких как неравновесная динамика нелинейных систем [308], перенос энергии в запрещенной зоне спектра [309], а также в начальной стадии структурных фазовых переходов первого рода [310].

4.1.1 Высоко-амплитудные бризеры

При $g \lesssim 1$, низкочастотный бризер может быть следствием захвата двух отдельных кинка и антикинка соответствующими ямами рельефа ПН. Влияние дискретности на динамику бризеров и вычисление эффективного потенциала ПН можно найти в работе Буша и Пейрара [311]. Приведем здесь только некоторые существенные идеи, а детали вычислений можно найти в первоисточнике [311].

Для того чтобы описать дискретный бризер в цепочке, мы используем анзац, основанный на точном бризерном решении модели СГ

$$u_n^{(\text{br})} = 4 \tan^{-1} \left\{ \frac{\sinh(k_B Z)}{\cosh[k_B(n - X)]} \right\}, \quad (4.1)$$

где X является центром бризера (здесь мы используем $a_s = 1$) и рассматривается как независимый параметр; $2Z(t)$ задает расстояние между двумя подкинками (фактически, между кинком и антикинком), которые образуют бризер, а параметр k_B задает частоту бризера $\omega_{\text{br}} = \sqrt{1 - k_B^2}$. Этот анзац (4.1) был использован для того, чтобы вычислить гамильтониан цепочки ФК [311] в терминах коллективных координат X , Z , и k_B . Он состоит из двух независимых частей для внутренней и пространственной динамики бризера. Если мы возьмем начальный профиль бризера (4.1) при времени $t = 0$, когда подкинки наиболее отделены друг от друга, т.е. $Z(t)|_{t=0} = Z_0$, то получим условие для такого начального профиля

$$\tanh(k_B Z_0) = k_B. \quad (4.2)$$

Тогда, вид для полной энергии бризера можно упростить, сохранив только первые два члена в рядах Фурье [так как коэффициенты убывают экспоненциально быстро как $1/\sinh(\pi^2/k_B)$], так что полная энергия будет

$$E_{\text{br}}(Z_0, X) = 16 k_B \left[1 + \frac{2\pi^2/k_B}{\sinh(\pi^2/k_B)} \cos(2\pi Z_0) \cos(2\pi X) \right]. \quad (4.3)$$

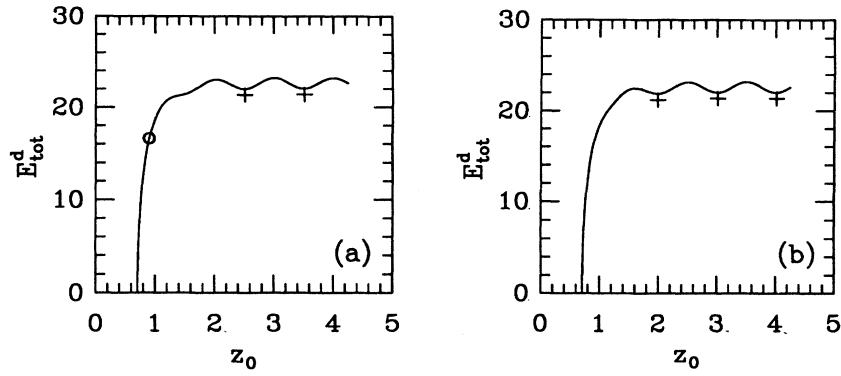


Рис. 4.1. Зависимость полной энергии бризера от Z_0 для (a) $X = 0$ и (b) $X = 1/2$. Сплошная линия соответствует уравнению (4.3), маркеры "плюс" соответствуют энергии стационарной конфигурации цепочки, а маркер "круг" соответствует численному результату [311].

Уравнение (4.3) нужно рассматривать одновременно с условием (4.2), которое меняет значение k_B для каждого значения Z_0 . Заметим, что для высоко-частотных (т.е., для мало-амплитудных) бризеров, когда эффекты дискретности малы, $k_B \rightarrow 0$ и мы вновь получим хорошо известное континуальное выражение для энергии СГ бризера $E^{br} = 16 k_B$. Для высоко-амплитудных бризеров уравнение (4.1) показывает существование двух ПН потенциалов, одного для X и другого для Z_0 . Они определяют положения, при которых будет захвачен начальный, находящийся в покое, профиль бризера.

Рисунок 4.1 показывает общую энергию бризера, вычисленную двумя различными методами для двух значений координаты бризера X . Сплошная линия является результатом полученным из уравнения (4.3), а символьные маркеры обозначают энергии, вычисленные при численном моделировании. Так как Z_0 измерена относительно X , то каждая из панелей (a) и (b) на рис. 4.1 указывает на то, что минимум ПН ям приходится на положения кинков между частицами.

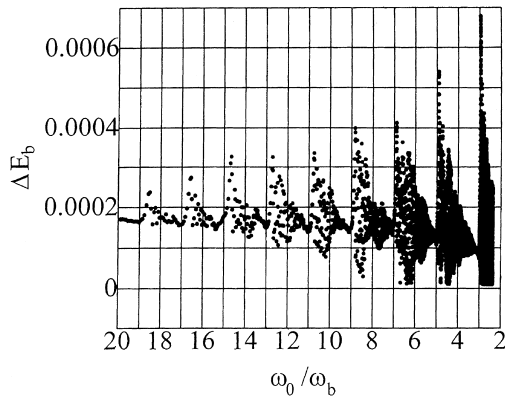


Рис. 4.2. Энергетические потери бризера ΔE_{br} как функция от ω_0/ω_{br} [312].

Используя молекулярную динамику и численную технику преобразования Фурье, Буш и Пейрар [311] показали, что бризер в модели ФК самопроизвольно совершает резкий переход из коротко-живущего в долго-живущее состояние. Этот тип динамики бризера может быть объяснен структурой спектра излучений испускаемых бризером. Амплитуда излучений в начале и в конце перехода отличается более чем на четыре порядка.

При небольшой степени дискретности, излучение фононов высоко-амплитудным дискретным бризером в модели ФК было недавно изучено Дмитриевым и др. [311]. Они показали, что в случае $g \gg 1$ имеет место резонанс между колебаниями бризера и фононами из нижней границы фононной зоны (с волновым вектором $k = 0$). В частности, Дмитриев и др. [312] установили численно, что в слабо дискретной ФК модели [т.е., для $0.1 \leq h \leq 0.5$, где $h^{-1} = \sqrt{g}$], резонанс между высоко-амплитудным бризером и фононами из нижней границы фононной зоны наблюдается когда $(2m + 1)\omega_{br} = \omega_0$ с положительным целым m . При выполнении этого условия бризер начинает испускать относительно большие всплески излучений в виде мало-амплитудных волновых пакетов. Наиболее заметные резонанс наблюдается при $m = 1$. Для систем с сильной дискретностью, резонансный эффект не проявляется, так как бризер проходит через резонансы очень быстро. Таким образом, резонансный эффект замечен при умеренной дискретности, но наиболее сильно проявляется при слабой дискретности.

На рис. 4.2 представлено изменение энергетических потерь $\Delta E_{\text{бр}}$ бризера на l -том полу-периоде колебаний как функция от $\omega_0/\omega_{\text{бр}}$. Одна точка соответствует одному полу-колебанию бризера или, другими словами, определенному периоду колебания l . Как показывает рис. 4.2, энергия, излучаемая на полу-колебании, в среднем, резко увеличивается при $(2m+1)\omega_{\text{бр}} = \omega_0$. Чем меньше m , тем резче увеличение, так что наиболее выраженный резонанс отмечается, когда тройная частота $3\omega_{\text{бр}}$ становится равной ω_0 .

4.1.2 Мало-амплитудные бризеры

В пределе малой амплитуды, когда ширина бризера намного больше шага решетки, эффектами дискретности можно практически пренебречь. Потери энергии бризера, связанные с излучением, будут достаточно малы. Эти потери обычно *экспоненциально малы* по отношению параметра определенного как отношение шага решетки к ширине бризера. Пренебрегая излучением, мы можем найти приближенные периодические решения для бризеров методом мульти-шкального асимптотического разложения. Строгая процедура нахождения таких высоко-частотных бризерных мод для общих моделей с произвольным потенциалом подложки была предложена несколькими авторами (см., например, статьи [313]–[315] и приведенные в них ссылки).

Мы будем искать решение нелинейного уравнения в пределе малых амплитуд, используя асимптотическое разложение

$$u_{\text{бр}}(x, t) = \mu \Phi(x, t) e^{i\Omega t} + \text{с.с.}, \quad (4.4)$$

где с.с. обозначает комплексное сопряжение, а $\mu = (\omega_{\text{мин}}^2 - \Omega^2)^{1/2}$ – малый параметр асимптотической процедуры. Подставив выражение (4.4) в дискретное уравнение движения и разложив потенциал подложки для малых u_n , $V'_{\text{sub}}(u) \approx \omega_{\text{мин}}^2 u + \beta u^2 + \tilde{\beta} u^3$, мы можем получить эффективное эволюционное уравнение для волнового пакета Φ , предполагая, что решетка изменяется медленно относительно шкалы порядка периода решетки (см. детали, например, в работе [314]),

$$2i\Phi_t - Q\Phi_{zz} + G|\Phi|^2\Phi = 0, \quad (4.5)$$

где переменная z связана с огибающей двигающейся с бризером, а параметры Q и G являются функциями параметров эффективного потенциала [314]. Уравнение (4.5) является нелинейным уравнением Шредингера (НУШ) и имеет локализованное солитонное решение при условии $QG > 0$, это последнее условие является необходимым для существования мало-амплитудных бризеров.

Эффективное уравнение НУШ (4.5) описывает бризер для любого типа потенциала подложки. Однако, из-за присутствия более высоких гармоник, только одна модель СГ допускает неизлучающие бризеры, так как интегрируемость этой модели обуславливает отсутствие эффектов обусловленных гармониками более высокого порядка. Для других типов потенциала подложки было строго показано, что точные бризерные решения не существуют [316, 317] и после возбуждения в цепочке бризер будет медленно излучать энергию. Такой тип долго-живущего излучающего процесса был описан для бризеров модели СГ [311, 312] и модели ϕ^4 [318].

В более общем случае, т.е. для случая дальнего взаимодействия между частицами в цепочке, асимптотическое разложение нельзя использовать и для описания малоамплитудных бризеров нужно использовать некоторую другую технику (см., например, работу [165]). В этом случае параметры бризера значительно отличаются от соответствующих параметров в локальной модели ФК [319].

4.2 Столкновения бризеров

Как мы уже упоминали выше, в пределе $g \gg 1$ ФК модель с хорошей точностью описывается СГ уравнением. Однако, это утверждение не всегда верно для много-солитонных столкновений, которые могут быть сильно неупругими даже в случае слабой дискретности.

Столкновения солитонов в слабо возмущенном СГ уравнении вначале были изучены теоретически Кившарем и Маломедом [27]. В случае двух-солитонных столкновений дискретность приводит к распаду высоко-амплитудного (т.е. низко-частотного) бризера на кинк-антикинктовую пару в результате его столкновения с другим кинком или бризером, а также к обусловленному излучением распаду кинк-антикинктовой пары в бризер. Недавно Кеврекидес с соавторами [320] использовали точное решение СГ уравнения, описывающее решетку бризеров и изучили асимптотическое взаимодействие между двумя бризерами. Они установили экспоненциальную зависимость взаимодействия от расстояния между бризерами, а также ее степенную зависимость от частоты.

Более интересные эффекты возможны для много-солитонных столкновений. В частности, изучение столкновения трех кинков в слабо возмущенном СГ уравнении, проведенное Кившарем и Маломедом [27], показало, что возможно протекание столкновения без потери энергии на излучение и с обменом моментами между сталкивающимися кинками, когда столкновение кинков происходит почти в одной точке.

Более недавно много-частичные эффекты столкновения солитонов активно изучались численно и аналитически [321]–[325] для слабо дискретной ФК модели. Эти исследования показали возможность относительно строгого, без

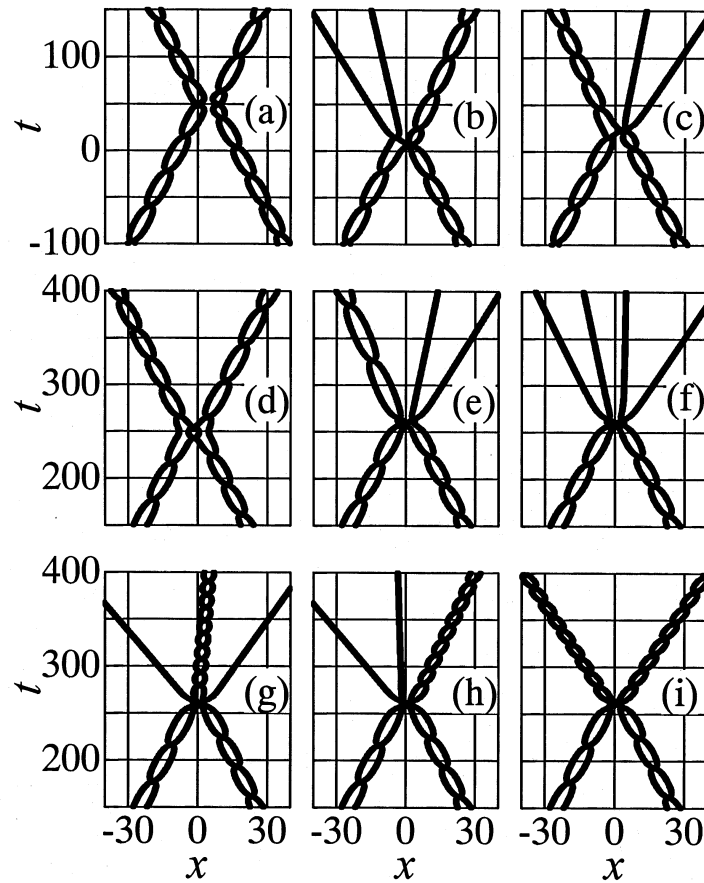


Рис. 4.3. Примеры рассеяния бризеров в модели ФК с $g = 25$ при начальных скоростях $v_{B2} = -v_{B1} = 0.2$, и частотах $\omega_{B1} = 0.1$ и $\omega_{B2} = 0.8\omega_{B1}$. Начальное расстояние между сталкивающимися бризерами (a) $D^0 = 20.0$, (b) $D^0 = 4.3$, (c) $D^0 = 8.1$, (d) $D^0 = 100.0$, (e) $D^0 = 104.1$, (f) $D^0 = 104.13$, (g) $D^0 = 104.26$, (h) $D^0 = 104.285$ и (i) $D^0 = 104.33$ [324].

излучения, обмена энергии между кинками и бризерами в ФК модели с очень слабой степенью дискретности. Полученные численно результаты хорошо согласуются с ранними теоретическими предсказаниями. Во многих случаях, резонансный обмен энергии между сталкивающимися солитонами может быть объяснен через возбуждение солитонных внутренних мод [326]. Однако, в случае много-солитонных столкновений, обмен энергиями между сталкивающимися солитонами заметен даже тогда, когда можно пренебречь ролью внутренних солитонных мод [191], так что этот обмен должен иметь другое объяснение.

Много-частичные эффекты становятся возможны только если во взаимодействие принимают участие по крайней мере три солитона и их столкновение происходит почти в одной точке. Для случая трех кинков вероятность этого события очень мала. Однако, если один из сталкивающихся солитонов является бризером, который состоит из двух связанных кинков, которые всегда находятся рядом друг с другом, неупругое столкновение с кинком или другим бризером становится более типичным.

Для иллюстрации этого на рис. 4.3 мы приводим некоторые типичные результаты столкновения между двумя бризерами в слабо дискретной ФК цепочке с $h = 0.2$ (напомним, что $h^{-1} = \sqrt{g}$), так что дискретность в самом деле дает очень слабое возмущение. Девять фрагментов рис. 4.3 соответствуют различным значениям начального расстояния D^0 между сталкивающимися бризерами. В случаях (a) и (d) столкновения практически упруги, т.е. между сталкивающимися бризерами не происходит обмена энергий и импульсами. Во всех остальных случаях, показанных на рис. 4.3, столкновение бризеров является неупругим. В случае (a), на момент столкновения, бризеры колеблются почти в противофазе и поэтому они отталкиваются друг от друга. В случае (d), сталкивающиеся бризеры колеблются почти в фазе, но столкновение остается упругим, так как оно происходит без включения трех- или четырех-кинковых эффектов взаимодействия. В противоположность этому, в случаях (b) и (c) можно заметить трех-кинковые эффекты, а в случаях (e–i) в столкновении участвуют все четыре подкинка. Результатом таких столкновений может быть распад одного сталкивающегося бризера (или даже двух) на свободные кинки. Процессы разрушения могут происходить только у бризеров с достаточно малыми внутренними частотами, в противном случае неупругость столкновений проявляет себя только в обмене энергией и импульсами

между бризерами, как это показано в случае (i). Во всех случаях, излучение при столкновении либо очень мало, либо практически отсутствует.

4.2.1 Много-солитонные эффекты

Причину безизлучательного обмена энергии между солитонами в слабо дискретной ФК цепочке можно понять из анализа *невозмущенного* СГ уравнения. В этом параграфе мы покажем, что если параметры сталкивающихся солитонов выбраны правильно, тогда два различных решения СГ уравнения могут быть очень близкими друг к другу в некоторый момент времени. Поэтому, если добавить к системе очень слабое возмущение, то одно решение может легко трансформироваться в другое. Этот физический механизм позволяет объяснить неупругое столкновение бризеров в почти интегрируемой системе. Более того, так как этот эффект предсказывается из анализа невозмущенного СГ уравнения, то он не должен зависеть от специального вида возмущения.

Рассмотрим кинк-бризерное столкновение, описываемое трех-солитонным решением СГ уравнения формы $u = v + w$, где функция v описывает кинк $v = 4 \tan e^B$ с $B = \delta_k(x - x_k - v_k t)$. Здесь $\delta_k^{-1} = \sqrt{1 - v_k^2}$ является шириной кинка, скорость кинка $0 \leq v_k < 1$, а параметр x_k определяет положение кинка при $t = 0$. Вторая часть решения $w = 4 \tan[(\eta X)/(\omega Y)]$ с

$$X = 2\omega (\sinh D - \cos C \sinh B) + 2\delta_k \delta_B (v_k - v_B) \sin C \cosh B$$

$$Y = 2\eta (\cos C + \sinh D \sinh B) - 2\delta_k \delta_B (1 - v_k v_B) \cosh D \cosh B,$$

где $C = -\omega \delta_B [t - v_B(x - x_B)] + 2\pi m$ с целым m , $D = \eta \delta_B (x - x_B - v_B t)$, $\delta_B^{-1} = \sqrt{1 - v_B^2}$, $0 \leq v_B < 1$ – скорость бризера, $\eta = \sqrt{1 - \omega^2}$, частота бризера ω ($0 \leq \omega < 1$) определяет амплитуду бризера (или его энергию покоя), а x_B задает положение бризера в момент времени $t = 0$.

Место и время кинк-бризерного столкновения задаются равенствами

$$x_c = \frac{v_k x_B - v_B x_k}{v_k - v_B}, \quad t_c = \frac{x_B - x_k}{v_k - v_B}. \quad (4.6)$$

Давайте рассмотрим два различных решения этой формы, u и u^* , для которых мы возьмем скорости солитонов с противоположными знаками, $v_k = -v_k^*$ и $v_B = -v_B^*$, а положения солитонов в момент времени $t = t_c$ для решения u^*

$$x_k^* = \frac{x_k(v_k + v_B) - 2v_k x_B}{v_B - v_k}, \quad x_B^* = \frac{2v_B x_k - x_B(v_k + v_B)}{v_B - v_k} \quad (4.7)$$

возьмем такими, чтобы $x_c = x_c^*$ и $t_c = t_c^*$. Величины всех остальных параметров в решениях u и u^* оставим одинаковыми. Легко заметить, что если

$$\omega(x_B - x_k) = 2\pi m \delta_B (v_k - v_B), \quad (4.8)$$

где m – целое, то в момент времени $t = t_c$ мы будем иметь $u(x, t_c) \equiv u^*(x, t_c)$, а для производных $-u_t(x, t_c) = -u_t^*(x, t_c)$. В силу дополнительных условий $v_k \rightarrow 0$ и $v_B \rightarrow 0$, мы имеем $u_t(x, t_c) \rightarrow 0$ и $u_t^*(x, t_c) \rightarrow 0$ для любого x , или $u_t(x, t_c) \rightarrow u_t^*(x, t_c)$ для любого x .

Таким образом, если эти условия почти выполнены, то в определенный момент времени $t = t_c$ два качественно разных решения u и u^* , так же как и их производные по времени u_t , u_t^* становятся близкими друг другу. С физической точки зрения, условие (4.8) означает, что все три солитона встречаются в одной точке. Когда это происходит, кинк-бризерное столкновение становится сильно неупругим даже в слабо возмущенной системе. Условие (4.8) может быть также записано через длину волны бризера $\lambda = 2\pi \delta_B |v_B|/\omega$ как $x_B/\lambda = m$, где m – целое число.

Численные результаты, представленные на рис. 4.4, показывают исключительно высокую чувствительность кинк-бризерных столкновений к изменению относительной фазы солитонов. Для того чтобы изменить относительную фазу были изменено начальное положение бризера x_B , в то время как все остальные параметры оставались фиксированными: $x_k = 0$, $v_k = 0$ для кинка и $\omega = 0.1$, $v_B = -0.2$ для бризера. До столкновения с бризером кинк находился в покое, поэтому изменение скорости кинка после столкновения ΔV_k может быть использовано как мера неупругости кинк-бризерного взаимодействия. Неупругость кинк-бризерного столкновения увеличивается вблизи точки $\phi = 0$ на три порядка величины.

4.2.2 Фрактальное рассеяние

Одним из наиболее интригующих свойств взаимодействий солитонов в неинтегрируемых моделях является фрактальная природа их рассеяния, которая впервые была обнаружена для кинк-антикинкковых столкновений в модели ϕ^4 [200]. Основные свойства фрактального солитонного рассеяния обычно объясняются возбуждением

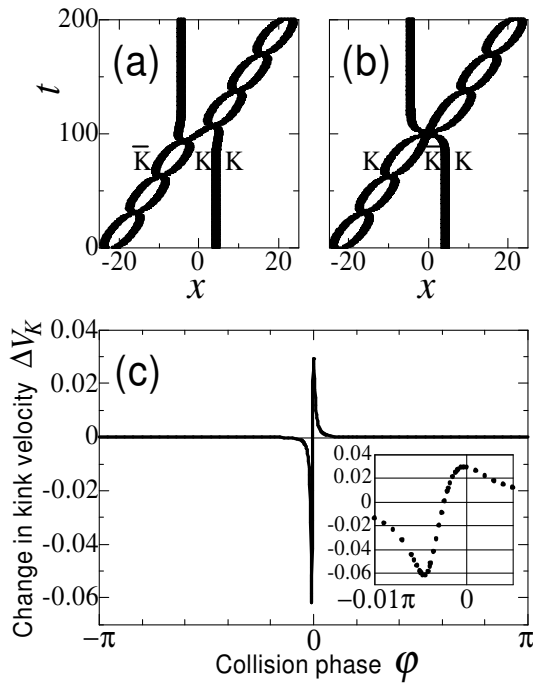


Рис. 4.4. Кинк-бризерное столкновения описанные СГ уравнением. Показаны зависящие от фазы двух–[(a)] и трех–[(b)] солитонные столкновения. Также дана зависимость изменения скорости кинка (c) от фазы столкновения в присутствии слабой дискретности ($h = 0.1$). Вставка показывает увеличенный участок рисунка.

внутренних солитонных мод, существование которых является важным свойством уединенных волн многих неинтегрируемых моделей, обладающих солитонами [191]. Физика фрактального рассеяния солитонов может быть понята как резонансный обмен энергиями между поступательным движением солитона и его внутренней модой [189, 195]. Подобный механизм был обнаружен во взаимодействии кинка с локализованной примесью [326].

Недавно Дмитриев и др. [324] описали другой физический механизм фрактального рассеяния солитонов в слабо дискретной ФК модели. В этом случае роль внутренних солитонных мод не существенна [191] и наблюдаемые при рассеянии солитонов фрактальные структуры должны объясняться качественно другим механизмом, который может быть понят как проявление многочастичных эффектов в столкновении солитонов. Эти эффекты обусловлены резонансным взаимодействием между "атомными" и "молекулярными" степенями свободы сталкивающихся составных солитонов.

Для того чтобы продемонстрировать этот эффект, мы рассмотрим столкновения двух бризеров в слабо дискретной модели ФК, когда два слабо взаимодействующих бризера распадаются на два отдельных удаляющихся бризера. После распада два независимых бризера двигаются в противоположных направлениях. Абсолютные значения их скоростей почти равны, так как в слабо дискретной цепочке закон сохранения момента почти выполняется, а бризеры были взяты такими, чтобы иметь почти одинаковые энергии. На рис. 4.5 показана зависимость скорости бризера после расщепления v_B^* от начального расстояния между сталкивающимися бризерами D^0 .

Функция $v_B^*(D^0)$ обладает свойством самоподобия на различных шкалах, которое обычно связано с фрактальным рассеянием. Четыре уровня такого подобия показаны на рис. 4.5(a)–(d), где каждый следующий график показывает зависимость на интервале, обозначенном на предыдущем графике малым интервалом I . Коэффициент увеличения для каждого такого шага составляет примерно 13.5. На каждой шкале функция $v_B^*(D^0)$ выглядит как чередование гладких и хаотических областей. Однако, при большем увеличении, каждая хаотическая область снова содержит хаотические области и гладкие пики. Таким образом, скорость расхождения $v_B^*(D^0)$ действительно является множеством гладких пиков на различных шкалах. В некоторых областях, ширина пиков становится бесконечно малой, так что плотность пиков стремится к бесконечности, хотя высота пиков остается в одной и той же шкале.

Фрактальная структура функции $v_B^*(D^0)$ подтверждает хаотический характер рассеяния бризеров в слабо дискретном случае. Фрактальная природа столкновений бризеров может иметь простое физическое объяснение. Как было показано выше, в слабо дискретной (и, следовательно, слабо возмущенной) системе бризеры притягиваются друг к другу со слабой силой. Как можно увидеть из рис. 4.5, хаотические области появляются там, где гладкие пики дают почти нулевую скорость $v_B^*(D^0)$. В этих областях, после взаимодействия и последующего расщепления бризеры получают очень небольшую скорость. При такой малой начальной скорости бризеры не могут преодолеть их взаимное притяжение и снова сталкиваются. При втором столкновении, из-за обмена импульсами, бризеры могут получить кинетическую энергию достаточную для ухода друг от друга, но здесь имеется конечная вероятность того, что полученная энергия будет ниже предела энергии разрывы. В последнем

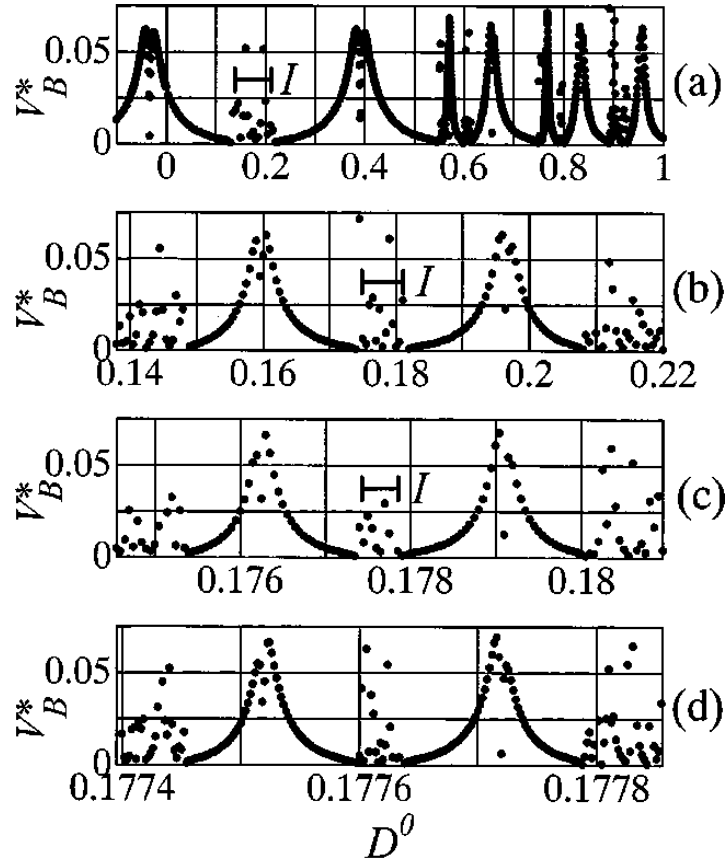


Рис. 4.5. Фрактальная структура (приведены четыре шкалы) столкновения бризеров, показанная как функция $v_B^*(D^0)$ [324].

случае, бризеры столкнутся в третий раз и т.д. Таким образом, последовательность столкновений приводит к резонансному обмену энергией между "атомной" (трансляцией кинков) и "молекулярной" (относительных колебаний) степенями свободы бризера и к фрактальному рассеиванию.

4.2.3 Холодный газ солитонов солитон!холодный газ

Как было описано выше, кинки, бризеры и фононы в уравнении СГ могут быть рассмотрены как газ свободных квазичастиц, которые не взаимодействуют между собой в рамках точно интегрируемой модели. В результате этого, общее число квазичастиц каждого типа остается постоянным. Естественно предположить, что такая картина справедлива и в случае слабо возмущенного СГ уравнения. Однако, это предположение допустимо только в отсутствии много-частичных эффектов, которые, согласно представленным выше результатам, могут приводить к совершенно другим результатам [325].

Для иллюстрации важности многочастичных эффектов, мы рассмотрим динамику, так называемого, "холодного газа солитонов", состоящего из кинков и антикинков, находящихся в начальный момент времени в покое. Рисунок 4.6 показывает временную динамику газа из 800 кинков и антикинков (показана только малая часть всей системы) в ФК системе со слабой дискретностью $h = 0.2$ (так что $g = 25$). Начальные условия задавались с помощью периодического решения уравнения СГ

$$u(x, t) = 2 \sin^{-1} \left\{ \operatorname{dn} \left[\frac{x - vt}{\sqrt{1 - v^2}}, \kappa \right] \right\}, \quad (4.9)$$

с двумя независимыми параметрами, v и κ , в пределе нулевой скорости $v = 0$. Параметр κ определяет пространственный период решения (на представленном внизу примере этот период равен 16).

Когда период решения достаточно большой, пара кинков на каждом периоде решения (4.9) может быть рассмотрена либо как кинк-антикинксовая пара, либо как как высокоамплитудный бризер, в который связаны внутренние подкинки. Вследствие естественного притяжения между кинками различной полярности, периодическая цепочка перемежающихся кинков и антикинков неустойчива. Даже без любого возмущения (кроме дискретности),

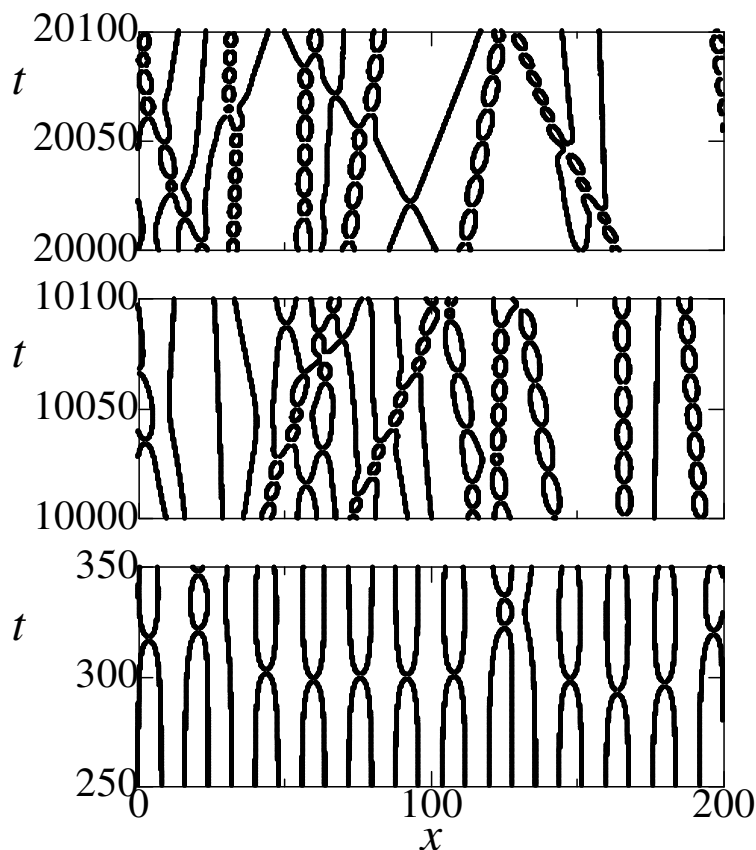


Рис. 4.6. Изменение со временем газа 800 кинков противоположной полярности (показана только малая часть цепочки) в слабо дискретной ФК цепочке [327].

кинки, как показано на нижней части рис. 4.6, после времени $t \sim 300$ начинают двигаться. Когда кинки взаимодействуют в парах, они сталкиваются практически упруго. Однако, многочастичные столкновения становятся все более и более частыми и вероятность неупругих столкновений постепенно возрастает.

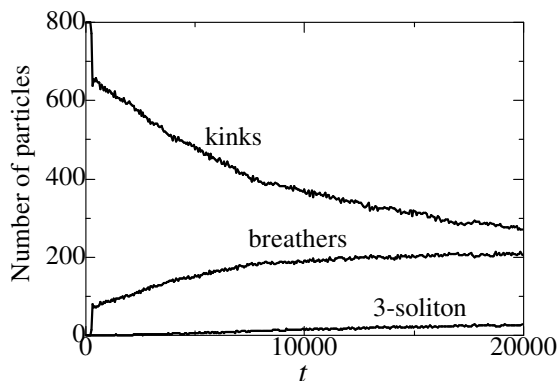


Рис. 4.7. Число кинков, бризеров и трех-солитонных состояний как функция времени [327].

На рис. 4.7 мы показываем долговременное изменение числа кинков, бризеров и, с целью определения источника неупругих процессов, частоты трех-солитонных состояний в системе. Для $t < 300$, до проявления неустойчивости решетки кинков, в системе отсутствуют бризеры. Для $t > 300$ число кинк-антикиновых пар постепенно уменьшается, а число бризеров и трех-солитонных состояний возрастает. Это происходит из-за двух основных механизмов. Первый механизм – это сплавнение кинка и антикинка, двигающихся с малыми относительными скоростями, в бризер. Вторым механизмом – образование бризеров в результате неупругих много-солитонных столкновений. Действительно, когда бризер сталкивается с кинком или с другим бризером,

вероятность трех-кинкового столкновения не мала, она пропорциональна плотности бризеров. Таким образом, вероятность неупругих столкновений возрастает с ростом числа бризеров в газе (см. рис. 4.7, где фракция трех-солитонных состояний фактически показывает число неупругих столкновений солитонов).

Из рис. 4.7 можно также заметить, что общее число солитонов, вычисленное как $N_{\text{tot}} = N_1 + 2N_2 + 3N_3 + \dots$, где N_n – число n -солитонных состояний, остается постоянным. Однако, число только кинков и бризеров не постоянно. Заметим также, что в силу очень слабой дискретности, потери энергии на излучение в этом примере тоже очень малы (оценки показывают, что на момент времени $t = 20000$ относительные потери на излучение не превышают 0.5%).

4.3 Примесные моды

Прежде чем анализировать дискретные бризеры, мы введем понятие нелинейных примесных мод как пространственно локализованных мод, обусловленных дефектами решетки. В мало-амплитудном пределе, такие моды хорошо известны в линейной теории колебаний решетки и они также могут быть найдены и в нелинейных решетках. Линейные и нелинейные примесные моды обеспечивают связь между линейной теорией колебаний решетки и теорией внутренних локализованных мод (дискретных бризеров) обусловленных нелинейностью беспримесной цепочки.

4.3.1 Структура и устойчивость

Локализованные моды, связанные с примесями (например, точечными дефектами в кристалле), хорошо известны в теории колебаний решетки (см., например, монографию [214]). Они также возможны во многих типах решеточных моделей, включая ФК цепочку. Для исследования локализованных мод такого типа в рамках линеаризованной модели ФК, мы рассмотрим малоамплитудные колебания атомов допустив, что $\sin u_j \approx u_j$. Тогда, пространственно локализованные моды линейной решетки на ячейке с примесью могут быть найдены аналитически с помощью техники функции Грина [173, 214]. Для случая линеаризованной ФК модели этот анализ был выполнен Брауном и Кившарем [49].

Функция Грина цепочки с примесями удовлетворяет уравнению Дайсона, и простой анализ его решений дает условия для существования примесных мод [49]. В результате оказывается, что обусловленные примесями локализованные моды возможны только с частотами, лежащими либо *выше*, либо *ниже* зоны частотного спектра фононов ($\omega_{\min}, \omega_{\max}$), где для стандартной модели ФК частоты $\omega_{\min} = 1$ и $\omega_{\max} = \sqrt{1+4g}$. Например, в случае изотопической примеси (т.е. дефектного атома с массой отличной от массы остальных атомов решетки) впервые проанализированном Лифшицем [211], мы должны взять $\Delta m \neq 0$, но $\Delta g = \Delta \epsilon = 0$. В результате локализованная примесная мода существует для $\Delta m > 0$ (т.е. для дефекта с тяжелой массой) ниже частотной зоны, $0 < \omega_l < \omega_{\min}$, а для $\Delta m < 0$ (т.е. дефекта с легкой массой) – выше частотной зоны, $\omega_l > \omega_{\max}$. Частоты моды ω_l определяется выражением

$$\omega_l^2 = \frac{(1+2g) \mp \sqrt{4g^2 + \Delta m^2(1+4g)}}{(1-\Delta m^2)}, \quad (4.10)$$

где знак $\pm$ определяет, соответственно, случай $\Delta m > 0$ или $\Delta m < 0$.

Обусловленные примесью локализованные моды могут быть легко описаны в нелинейной ФК цепочке в длинноволновом пределе, когда становится допустимым эффективное уравнение СГ. В этом случае, решение для нелинейной примесной моды можно получить как бризерную моду, захваченную примесью [49, 328, 329]. Аналогично обсужденному выше линейному приближению, нелинейные примесные моды могут существовать только с частотами, лежащими либо ниже, либо выше зоны частотного спектра фононов. Однако, форма нелинейной моды, модифицированная нелинейностью, приобретает несколько новых свойств. В частности, сама нелинейность может расширить условие существования нелинейной моды (см., например, ссылки [49, 328]–[331]), однако, анализ устойчивости показывает, что такие нелинейные локализованные моды, возбужденные вблизи локальной примеси, устойчивы только в областях существования соответствующих линейных мод [49, 330].

В качестве примера давайте рассмотрим случай когда только $\Delta \epsilon \neq 0$, так что соответствующая континуальная версия ФК модели описывается возмущенным СГ уравнением

$$u_{tt} - u_{zz} + \sin u = -\epsilon_1(z) \sin u, \quad (4.11)$$

где $z = x/d$, $d = a_s\sqrt{g}$ и $\epsilon_1 = \Delta\epsilon/2\sqrt{g}$. В линейном приближении примесная мода для уравнения (4.11) задается выражением

$u = A \exp(\epsilon|z|/2) \cos(\omega_l t)$, где $\omega_l = \sqrt{1-\epsilon^2/4}$. Такая мода существует только при условии $\epsilon < 0$. Для анализа примесной моды в нелинейном случае удобно вместо уравнения (4.11), сделав замену $u = \Psi e^{it} + \Psi^* e^{-it}$ (звездочка

обозначает комплексное сопряжение), ввести эффективное уравнение огибающей. Предполагается, что Функция огибающей Ψ медленно меняется и достаточно мала для того, чтобы рассмотреть нелинейность в самом малом порядке. Тогда, возможно свести задачу к эффективному уравнению НШ

$$2i\Psi_t - \Psi_{zz} - \frac{1}{2}|\Psi|^2\Psi = 0 \quad (4.12)$$

с условием сшивки при $z = 0$

$$\Psi_z|_{0+} - \Psi_z|_{0-} = \epsilon_1\Psi(0). \quad (4.13)$$

Сшивая два солитонных решения уравнения НШ (4.12)–(4.13), мы можем найти приближенное решение для нелинейной примесной моды

$$u(z, t) = 4\beta \frac{\cos(\Omega_l t)}{\cosh[\beta(|z| + z_0)]}, \quad (4.14)$$

где частота примесной моды Ω_l определяется соотношением $\Omega_l = \sqrt{1 - \beta^2/2}$ и, в отличие от линейного случая, теперь зависит от амплитуды моды β . Уравнение, которое следует из условия сшивки (4.13), принимает форму

$$\tanh(\beta z_0) = -\frac{\epsilon_1}{2\beta}. \quad (4.15)$$

Это уравнение определяет структуру нелинейной примесной моды, которая имеет различные формы для разных знаков ϵ_1 . Для $\epsilon_1 < 0$, уравнение (4.15) приводит к неравенству $z_0 > 0$ и примесная мода будет иметь форму подобную гармоническому случаю [см. рис. 4.8(a)]. Более того, для $z_0 \rightarrow \infty$ она возвращается к линейному случаю. В случае $\epsilon_1 > 0$, уравнение (4.15) приводит к решению с $z_0 < 0$ и примесная мода будет иметь два максимума [см. рис. 4.8(b)]. Последний случай показывает, что в принципе локализованная примесная мода может существовать только благодаря нелинейности в случаях, когда ее существование невозможно в линейном пределе. Однако, этот новый тип локализованных примесных мод не дает устойчивых решений [49, 330].

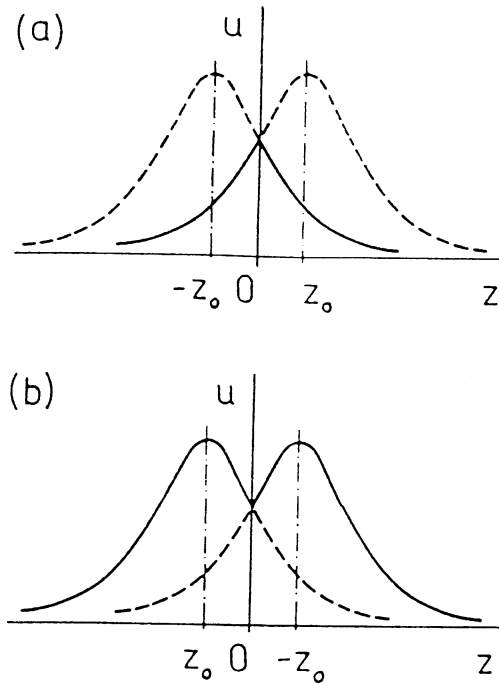


Рис. 4.8. Профили низко-частотной нелинейной моды для (a) $\epsilon_1 < 0$ (устойчивый) и (b) $\epsilon_1 > 0$ (неустойчивый). Параметр z_0 определен в уравнении (4.15).

Аналогично, мы можем найти примесные моды с частотами, лежащими выше максимальной частоты линейной решетки $\omega_{\max}$, снова используя приближение медленно изменяющейся огибающей моды. В этом случае мы начинаем с поиска решения модели ФК, описывающего не совпадающие по фазе колебания атомов. Полученное приближенное решение [49] имеет вид

$$u_j = 4(-1)^j \beta \frac{\cos(\Omega_l t)}{\sinh[\beta(|z| + z_0)]}, \quad (4.16)$$

оно показано на рис. 4.9. Параметр сшивки z_0 определяется из уравнения

$$\coth(\beta z_0) = \frac{\epsilon_1}{2\beta}, \quad (4.17)$$

а частота моды

$$\Omega_l = \omega_{\max} + \frac{\beta^2}{2\omega_{\max}}, \quad (4.18)$$

лежит выше максимальной частоты спектра. Такая мода существует только в случае $\epsilon_1 > 0$.

Подобные типы примесных мод могут быть найдены и в других моделях. Воттис с соавторами [332] анализировали короткие секции цепочки ДНК с дефектом, с целью понять как частота, амплитуда и локализация бризерных мод зависит от прочности связей между парами оснований вдоль цепочки и между цепочками. Результаты показали, что присутствие дефекта в цепочке допускает существование локализованной бризерной моды. Значения энергии взаимодействия основания с ближайшими соседями хорошо согласуются с результатами для возмущений структуры бризерной моды на примеси.

Как упоминалось выше, одной из основных задач для существующих нелинейных примесных мод является их устойчивость. Хотя такие примесные моды могут существовать даже для условий, когда линейные примесные моды отсутствуют, но в большинстве случаев эти новые моды фактически неустойчивы. Одним из самых простых способов провести анализ устойчивости рассмотренных выше нелинейных мод, это ввести небольшое рассогласование между двумя частями составного решения (4.14). Тогда малоамплитудные колебания около стационарного решения будут характеризоваться частотой [49] $\tilde{\omega}^2 = -3\epsilon_1(\beta + \epsilon/2)$, которая ясно показывает, что нелинейная мода неустойчива при $\epsilon_1 > 0$, т.е. только при условии, когда линейная задача не имеет пространственно локализованных решений. Таким образом, даже когда существуют стационарные локализованные решения новой формы, только одна нелинейность не позволяет расширить условия существования локализованных примесных мод.

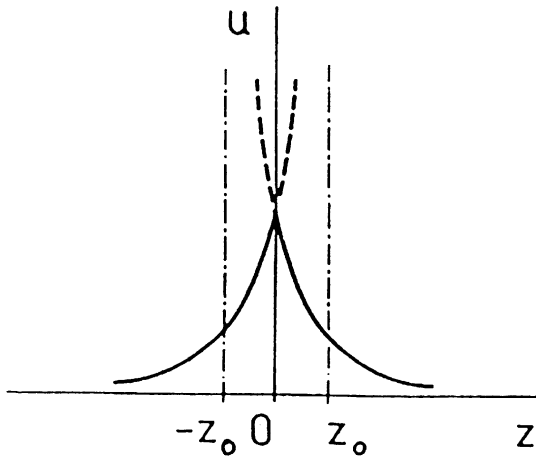


Рис. 4.9. Профиль высокочастотной нелинейной примесной моды при $\epsilon_1 > 0$. Параметр z_0 определяется из уравнения (4.17).

Устойчивость нелинейных примесных мод для НУШ обсуждалась Богданом и др. [333]. Они использовали анализ, подобный развитому Вахитовым и Колоковым [334] для уединенных волн обобщенного уравнения НШ в однородной среде, и сформулировали устойчивость в терминах инварианта

$$N(\omega_l) = \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x; \omega_l)|^2 dx.$$

В результате, они установили, что нелинейная мода при $\epsilon_1 > 0$ неустойчива, неустойчивость соответствует условию $dN(\omega_l)/d\omega_l < 0$. Такая неустойчивость проявляется в экспоненциальном росте антисимметрических возмущений, которые сдвигают солитон в одну сторону от примесной моды, которая окончательно отбрасывает локализованную моду в силу отталкивающего эффективного взаимодействия с ней, согласно с предсказанием основанном на эффективном потенциале. Более общий анализ устойчивости примесных был проведен Сухоруковым и др. [335], которые рассмотрели нелинейные локализованные моды обусловленные нелинейной примесью в обобщенном уравнении НШ и описали *три типа нелинейных примесных мод*: одно- и дву-выпуклых симметричных локализованных мод (как обсужденные выше) и асимметричные локализованные моды (возможные для нелинейной примеси). Они получили *общий аналитический критерий устойчивости* для нелинейных локализованных мод и рассмотрели в деталях случай степенной нелинейности. Сухоруков и др. [335] обсудили также несколько сценариев обусловленной неустойчивостью динамики нелинейных примесных мод, включая разрушение моды или переключение в новое устойчивое состояние, и коллапса на ячейке примеси.

В дискретной цепочке потенциал взаимодействия между локализованной модой и примесью модифицируется эффективным периодическим потенциалом Пейерлса-Набарро. Из-за сложной структуры экстремальных точек общего эффективного потенциала мода сдвигается от ячейки с примесью, создавая *асимметричную нелинейную примесную моду*. Такой тип (высоко-частотных) нелинейных примесных мод был проанализирован для решетки без потенциала подложки, но с нелинейным межатомным взаимодействием [331, 336]. Было показано, что такая мода может существовать даже для примеси с тяжелой массой (т.е. для $\epsilon_1 > 0$, см. выше). Такие моды следует ожидать для решетки с потенциалом подложки, но они до сих пор не исследованы.

Другой очень важной задачей, относящейся к теории нелинейных примесных мод, является затухание моды в силу излучения фонов. Для малочастотных примесных мод такое эффективное затухание обычно происходит по степенному закону [49, 307], в то время как для высоко-частотных мод время их жизни может быть значительно короче (см. работу [49] и приведенные в ней ссылки).

4.3.2 Взаимодействие солитонов с примесями

В общем случае взаимодействие кинка с примесью может быть описано простым образом, учитывая тот факт что локальная примесь повышает эффективный потенциал кинка (см. выше главу 3). Однако, модель классической частицы применима только в случае, когда примесь не допускает существования *примесной моды* – локализованного колебательного состояния на примеси. Такая примесная мода может возбуждаться при рассеянии кинка, что может изменить результат прохождения кинка. Важность примесных мод при взаимодействии кинка с примесями была отмечена в работах Фрагис и др. [337], Кившаря и др. [326], Жанга и др. [338]–[341], Маломеда с соавторами [342], и Белова и Кудрявцева [343]. Всесторонний обзор различных типов взаимодействия кинков с примесями можно найти в статье [229].

Важным эффектом, открытым при численном моделировании [326], является то, что кинк может быть полностью *отражен притягивающей примесью* из-за резонансного обмена энергией между трансляционной модой кинка и примесной модой. Этот резонансный феномен очень подобен резонансам наблюдаемым при кинк-антикинкковых столкновениях в нелинейных Клейн-Гордоновских уравнениях [189, 195, 200, 201].

Чтобы продемонстрировать источник резонанса кинк-примесных взаимодействий, мы начнем с модели СГ (3.83), в которую включена локальная подобная точке примесь, т.е. $f(x) = \delta(x)$. Когда примесь отсутствует, модель (3.83) демонстрирует движение кинка без возмущений. В присутствии δ -подобной примеси, потенциал (3.85) становится $U(X) = -2\epsilon \operatorname{sech}^2 X$, т.е. при $\epsilon > 0$ примесь притягивает кинк.

Кившарь и др. [326] (см. также Жанг и др. [338]–[340]) изучили численно кинк-примесное взаимодействие при $\epsilon > 0$. Они нашли, что существуют *три* различных области начальных значений скорости кинка, а именно, области движения, захвата и отражения. Существует критическая скорость v_c (например, $v_c \approx 0.2678$ для $\epsilon = 0.7$) такая, что если входящий кинк имеет скорость большую чем v_c , то он проходит не упруго через примесь и удаляется от нее без изменения направления движения, теряя часть своей кинетической энергии на излучение и возбуждение примесной моды. В этом случае, имеется линейное соотношение между квадратами начальной скорости кинка v_i и его конечной скоростью v_f : $v_f^2 = \alpha(v_i^2 - v_c^2)$, где константа $\alpha \approx 0.887$. Если входящая скорость кинка меньше чем v_c , кинк уже не может убежать на бесконечность от примеси сразу после первого столкновения. Следовательно, он остановится на некотором расстоянии и вернется обратно (из-за действия на кинк притягивающей силы от примеси) и снова провзаимодействует с примесью. Для большинства значений скорости, кинк снова потеряет энергию при втором взаимодействии, и в конце-концов будет захвачен примесью. Однако, для некоторых специальных значений скорости вхождения, кинк может убежать в *противоположном* направлении сразу после второго столкновения, т.е. кинк может быть полностью *отражен* примесью. Отражение возможно только тогда, когда начальная скорость кинка берется из определенных резонансных окон (см. рис. 4.10). При помощи численного моделирования Кившарь и др. [326] нашли число таких окон. Используя идею резонансного обмена энергией между трансляционной модой кинка и примесной модой, можно аналитически предсказать положения резонансных окон [326]

$$v_n^2 \approx v_c^2 - \frac{11.0153}{(n t_{\text{im}} + 0.3)^2}, \quad n = 2, 3, \dots, \quad (4.19)$$

где t_{im} – период колебания примесной моды, а v_c – критическая скорость. Эта формула приведена для того, чтобы показать ее очень хорошую точность (см. соответствующие данные в таблице приведенной Кившарем и др. [326]).

Для того чтобы обеспечить объяснение резонансных структур при кинк-примесных взаимодействиях, заметим вначале, что нелинейная система (3.83) допускает локализованные моды. Линеаризуя уравнение (3.83) для малых u , мы можем найти аналитически форму примесной моды

$$u_{\text{im}}(x, t) = a(t) e^{-\epsilon|x|/2}, \quad (4.20)$$

где $a(t) = a_0 \cos(\Omega t + \theta_0)$, частота примесной моды $\Omega = \sqrt{1 - \epsilon^2/4}$, а θ_0 – начальная фаза. Фактически, примесная мода (4.20) может быть рассмотрена как захваченная примесью мало-амплитудная колебательная мода с энергией $E_{\text{im}} = \Omega^2 a_0^2 / \epsilon$.

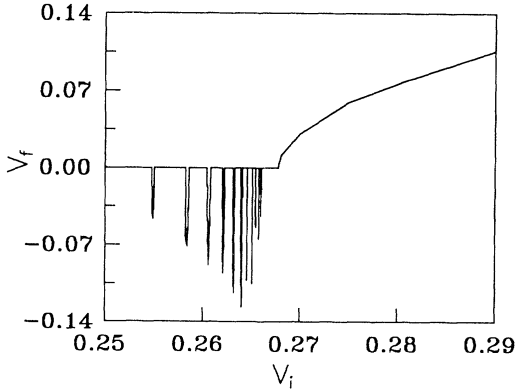


Рис. 4.10. Конечная скорость кинка v_f как функция начальной скорости кинка v_i при $\epsilon = 0.7$. Ноль конечной скорости означает, что кинк захвачен примесью [326].

Теперь мы можем проанализировать кинк-примесные взаимодействия методом коллективной координаты, приняв во внимание две динамические переменные, а именно – координату кинка $X(t)$ и амплитуду примесной колебательной моды $a(t)$ [см. уравнение (4.20)]. Подставляя анзац

$$u = u_k + u_{\text{im}} = 4 \tan^{-1} e^{[x - X(t)]} + a(t) e^{-\epsilon|x|/2} \quad (4.21)$$

в Лагранжиан системы и предполагая, что a и ϵ достаточно малы для того, чтобы можно было пренебречь членами высокого порядка, можно получить следующий (приведенный) эффективный лагранжиан

$$L_{\text{eff}} = \frac{1}{2} m \left(\frac{dX}{dt} \right)^2 + \frac{1}{\epsilon} \left[\left(\frac{da}{dt} \right)^2 - \Omega^2 a^2 \right] - U(X) - aF(X), \quad (4.22)$$

где функция $U(X)$ дана выше, а $F(X) = -2\epsilon \tanh X \operatorname{sech} X$. Уравнения движения для динамических переменных будут иметь вид

$$\begin{aligned} m \frac{d^2 X}{dt^2} + U'(X) + aF'(X) &= 0, \\ \frac{d^2 a}{dt^2} + \Omega^2 a + \frac{\epsilon}{2} F(X) &= 0. \end{aligned} \quad (4.23)$$

Система (4.23) описывает частицу (кинк) с координатой $X(t)$ и эффективной массой m , находящуюся под действием притягивающего потенциала $U(X)$ ($\epsilon > 0$), и "слабо" взаимодействующую с гармоническим осциллятором $a(t)$ (примесная мода). Здесь мы говорим "слабо", так как член взаимодействия $aF(X)$ имеет порядок $O(\epsilon)$ и он уменьшается экспоненциально. Система (4.23) является обобщением хорошо известного уравнения $m_k d^2 X / dt^2 = -U'(X)$, описывающего взаимодействие кинка с примесью в адиабатическом приближении.

Динамическая система (4.23) может описать все свойства кинк-примесных взаимодействий. Первое, она может быть использована для вычисления порогового значения скорости захвата кинка, которое дается уравнением [339, 340]

$$v_{\text{thr}} = \frac{\pi \epsilon}{\sqrt{2}} \frac{\sinh[\Omega Z(v_{\text{thr}})/2v_{\text{thr}}]}{\cosh(\Omega \pi / 2v_{\text{thr}})}, \quad (4.24)$$

где $Z(v) = \cos^{-1}[(2v^2 - \epsilon)/(2v^2 + \epsilon)]$. Сравнивая аналитические результаты с результатами прямого численного моделирования уравнения (3.83), Жанг и др. [338] нашли, что теория возмущений допустима только для очень малых ϵ ($\epsilon \leq 0.05$), в то время как формула (4.24) дает хорошие оценки скорости $v_{\text{thr}}(\epsilon)$ для ϵ из интервала (0.2, 0.7).

Как было указано Кившарем и др. [326] и Жангом и др. *et al.* [339], уравнение (4.23) может быть использовано как качественная модель для объяснения резонансного обмена энергиями между классической частицей и осциллятором. Резонансное отражение частицы от потенциальной ямы соответствует отражению кинка от притягивающей примеси. Следовательно, коллективно-координатный подход может дать качественное объяснение резонансных эффектов при взаимодействии кинка с примесью. В то же самое время, коллектив-координатная модель (4.23) консервативна, поэтому она не может объяснить неупругие эффекты, типа отложенного захвата

кинка примесью. Такие эффекты могут быть объяснены только при введении других степеней свободы системы, например, эффективного взаимодействия с фононами или с некоторой другой подсистемой [342].

Важно отметить, что подобные резонансные феномены отмечены также при взаимодействии кинка с примесью в модели ϕ^4 [340, 343]. Однако, резонансные структуры ϕ^4 кинк-примесных взаимодействий здесь более сложны чем в СГ модели, так как ϕ^4 кинк имеет внутреннюю (профильную) моду, которую также можно рассмотреть как эффективный осциллятор. Жанг и др. [340] развили коллектив-координатный подход учитывающий три динамические переменные. Они нашли, что из-за эффекта соединения примесной и кинковой внутренних колебательных мод некоторые резонансные окна могут исчезать.

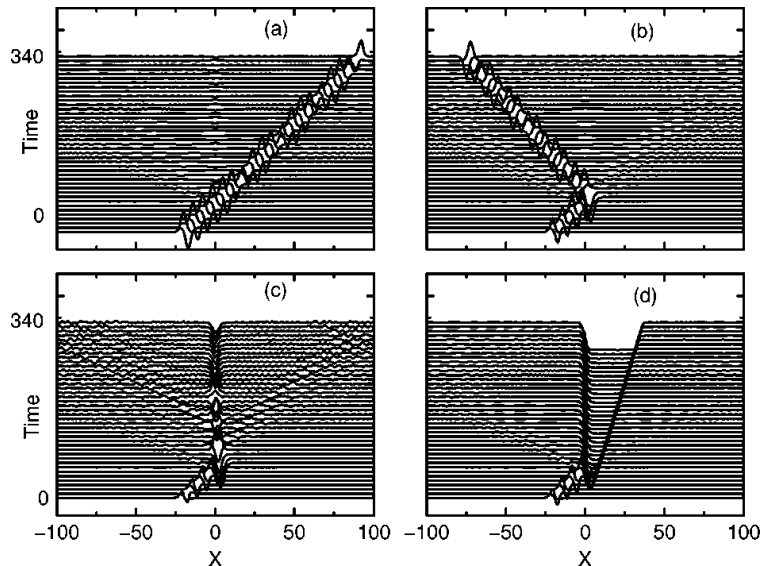


Рис. 4.11. Изменение поля $u(x, t)$ для бризера с начальной частотой $\omega_{br} = 0.4$, скоростью $v_{br} = 0.35$, и разными начальными фазами, при его рассеянии на притягивающей примеси. При фазе $\theta = \pi/2$ бризер (a) проходит через примесь, (b) отражается при $\theta = 2\pi/15$, (c) захватывается при $\theta = \pi/30$ и (d) распадается на кинк-антикинк-овую пару для $\theta = \pi/15$. В последнем случае, кинк захватывается примесью, а антикинк продолжает двигаться вперед [238].

Описанные выше резонансные взаимодействия были проанализированы численно и аналитически для единичной примеси. Можно сказать, что физический механизм этого эффекта был хорошо понят. Ясно, что в случае нескольких примесей четкие процессы обмена энергии наблюдать гораздо сложнее (для случая двух примесей см. работу Жанга с соавторами [341]). Однако, следует ожидать, что увеличение числа примесей должно приводить к нарушению тонкой структуры резонансов, особенно для случая случайной решетки. Так, возможным механизмом торможения кинка в случайной среде является возбуждение на примесях локализованных колебательных мод, но не излучение мало-амплитудных волн. Этот механизм был упомянут в более ранней работе Тсируи [344], в которой обсуждалось движение солитонов в нелинейной решетке с изотопическим беспорядком (см. также работу Маломеда [345] для случая ϕ^4 кинка).

Когда дискретный бризер (или нелинейная локализованная мода) взаимодействует с примесью, можно наблюдать резонансные эффекты, подобные описанным выше [216]. В частности, из-за наложения частот бризера и локализованной моды, локальное изменение случайной массы только на 5–10% уже достаточно для захвата решеткой бризера. Форинаш и др. [216] также наблюдали, что дискретность решетки вызывает более сильное взаимодействие между локализованными бризерной модой и примесной модой, хотя они и не смогли описать этот эффект качественно в рамках метода коллективной координаты, так как форму движущегося в дискретной цепочке бризера не удается получить даже численно. Множество интересных эффектов было описано by Forinash *et al.* [216] для случая взаимодействия бризера с возбужденной примесью. В частности, они отметили, что беспорядок, связанный с примесями, может действовать как катализатор для нелинейной локализации энергии, так как может приводить к сплаву двух нелинейных возбуждений в одно большое возбуждение.

Позже, Жанг [238] представил более детальные результаты о примесном рассеянии бризеров в модели СГ и показали как результат рассеяния зависит от начальной скорости бризера, от внутренней частоты колебания и фазы. В частности, для притягивающей примеси бризер может либо быть захвачен примесью, пройти через нее, полностью отразиться от нее или распасться на кинк-антикинк-овую пару. Некоторые примеры таких взаимодействий представлены на рис. 4.11 (a–d), для разных значений внутренней фазы набегающего бризера.

Как было обнаружено Жангом [238], для отталкивающей примеси мало-амплитудный бризер ведет себя подобно твердой частице и результат рассеяния главным образом определяется начальной скоростью бризера. В противоположность этому, рассеяние высоко-амплитудного бризера зависит одновременно от начальной скорости и фазы. Здесь при фиксированной начальной скорости бризер может либо проходить через примесь или отражаться от нее в зависимости от значения фазы – см. рис. 4.11(a)–(d). Существование этого сложного и интересного явления обусловлено взаимодействием между внутренней и трансляционной модами бризера, которые становятся сильно связанными при нахождении бризера близи области примеси.

Чен и др. [346] исследовали численно взаимодействия между примесями и бризерами в цепочке связанных нелинейных маятников совершающих вертикальные колебания. Эта модель описывается моделью ФК с внешней силой. Эксперименты показали, что дефектный маятник притягивает или отражает солитоны, включая бризеры и кинки, хорошо подтверждая численные результаты. Характеристика взаимодействий, притяжение или отражение, зависят не только от полярности примесей, но также от несущей частоты и топологии солитонов. Эти наблюдения свидетельствуют о том, что во взаимодействии бризерных и кинковых решений с протяженными и локализованными дефектами имеется некоторое подобие. Интенсивность взаимодействия связана с интенсивностью дефекта и амплитудой движения.

4.4 Дискретные бризеры

4.4.1 Общие замечания

В физике твердого тела явление локализации обычно воспринимается как результат внешнего беспорядка, который нарушает дискретную трансляционную инвариантность точной кристаллической решетки. Подобными примерами являются локализованные колебательные моды около примесей кристалла [347] и андерсоновская локализация электронов в неупорядоченной среде [348]. Типичным представлением является то, что в точной решетке, свободной от внешних дефектов, фононы и электроны могут существовать только в форме распространенных, плоско-волновых состояний. Это твердо укоренившееся убеждение было сильно поколеблено в конце 1980-х годов открытием, так-называемых, *внутренних локализованных мод*, или *дискретных бризеров* как типичных возбуждений правильных, но сильно нелинейных, пространственно-протяженных дискретных систем.

Для ангармонических решеток без потенциала подложки, такие локализованные бризеро-подобные состояния существуют в форме так-называемых *внутренних локализованных мод* [349, 350] энергия которых локализована всего на нескольких ячейках, вследствие нелинейного взаимодействия между частицами цепочки. Различные свойства внутренних локализованных мод обсуждены во многих публикациях (см., например, работы [161], [351]–[370] и обзоры Такено и др. [351], Сиверса и Пэйджа [371], Киселева и др. [372], а также Флаха и Вилиса [373]). Важным теоретическим результатом было строгое математическое доказательство существования нелинейных локализованных мод [374], основанное на анализе системы слабо взаимодействующих осцилляторов (в так-называемом, антиконтинуальном пределе – см. работы [375, 376]).

Первоначальной моделью в которой впервые были описаны дискретные бризеры является цепочка частиц с ангармоническим межатомным взаимодействием. Она описывает одномерную решетку без потенциала подложки, в которой каждый атом взаимодействует только со своими ближайшими соседями через симметрический нелинейный потенциал [349, 350]. Эта модель допускает существование двух типов локализованных мод (см. ниже рис. 4.12). Локализованная Сиверс-Такеновская (СТ) мода имеет симметрическую структуру [350] с своим максимумом амплитуд расположенном на узле решетки, а Паже (П) мода имеет асимметрическую структуру с центром локализации между соседними узлами [352]. Обе эти моды могут двигаться вдоль решетки [377, 378], но их движение находится под сильным влиянием дискретности решетки, подобно описанным выше ФК кинкам. Адиабатическое движение локализованной моды может быть также рассмотрено как последовательные переходы между СТ и П модами. Из-за дискретности решетки эти два состояния имеют различные энергии [379], и могут быть рассмотрены как два состояния одной и той же моды адиабатически двигающейся через некоторый эффективный ПН периодический потенциал. В такой картине П-мода будет соответствовать минимуму эффективного ПН потенциала, а СТ-мода – его максимуму, что отражает динамическую неустойчивость моды.

Как известно, нелинейная локализованная мода появляется в моделях, где нелинейность связана с потенциалом подложки, подобных простейшему типу ФК цепочки. Самой типичной моделью является мало-амплитудный предел ФК модели с квартетным потенциалом подложки. Эта модель была изучена несколькими авторами [161, 351, 357, 367, 380] и дискретные бризеры были обнаружены с частотами *ниже* минимальной частоты линейного спектра.

Было аналитически и численно продемонстрировано существование эффективного ПН потенциала для двигающейся локализованной моды, подобного ПН потенциалу для ФК кинка (см., например, работы [381, 382]). Спектр линейной дискретной ФК цепочки ограничен сверху критической максимальной частотой, существование которой обусловлено дискретностью. Поэтому естественно ожидать нахождения локализованных мод с частотами

выше критической частоты, подобных нечетным СТ модам или четным П модам в цепочке с ангармоническими межатомными взаимодействиями. Важной физической задачей, связанной с этими локализованными нелинейными модами является доказательство того, что они являются долгоживущими возбуждениями, способными внести свой вклад во многие свойства нелинейных дискретных систем.

4.4.2 Существование и устойчивость

Для доказательства существования дискретных бризеров по существу требуется только наличие двух компонентов: (i) первое, система должна быть действительно нелинейной, т. е., частота моды должна зависеть от ее амплитуды; (ii) второе, система должна быть дискретной, такой чтобы линейный фононный спектр имел щели и не простирался до бесконечных частот. При этих условиях можно найти локальные моды с частотой и ее высшими гармониками лежащими вне линейного частотного спектра. Тогда, интуитивно понятно, что эта локальная мода не может испускать никакого излучения линейных фононов (по крайней мере в главном порядке) и энергия локальной моды будет оставаться постоянной. Такая локальная мода может существовать в течение долгого времени как квази-устойчивое решение. На самом деле, в рамках этих допущений можно доказать более строгое утверждение, т. е. существование точных решений с бесконечным временем жизни [374, 375].

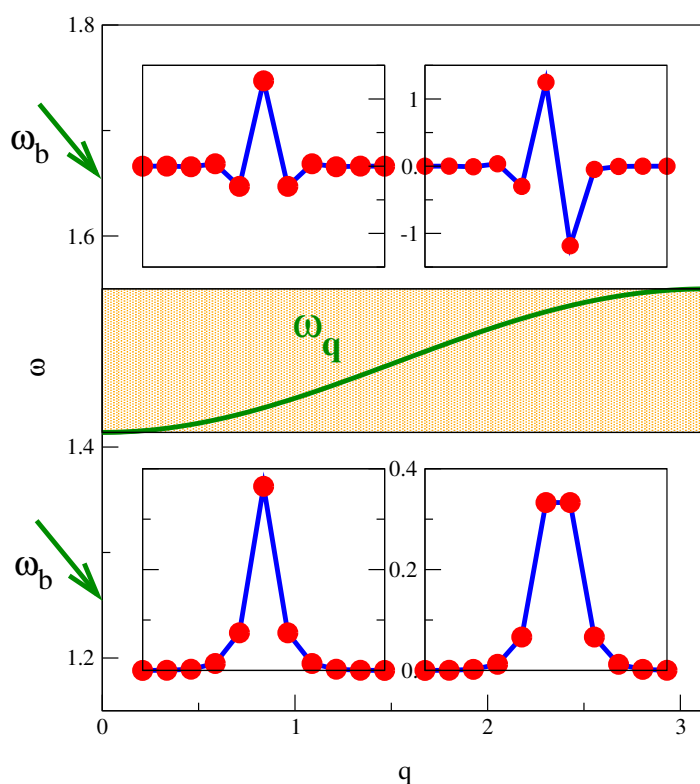


Рис. 4.12. Линейный спектр $\omega(q)$ и структура четырех типов дискретных бризеров (вставки) в цепочке с потенциалом подложки. Стрелки показывают точные частоты бризеров для двух нижних и верхних структур.

Эти аргументы ясно дают понять почему точные бризерные решения в модели СТ не являются общими. Здесь в простирающимся до бесконечности линейном фононном спектре всегда будут лежать гармоники бризеров и отсутствие линейного излучения явилось бы очень неожиданным феноменом. Хотя дискретное уравнение НШ является дискретным, оно также является исключением, так как для гарантированного существования точного решения необходимо чтобы несущая частота дискретного бризера (нет ни каких гармоник) не лежала в линейном фононном спектре. Такие же аргументы также подсказывают, что существование квази-периодических дискретных бризеров в гамильтоновых системах с протяженными линейными фононами, так же являются исключением. Здесь причина состоит в том, что временной спектр Фурье такого решения, являющийся плотным на действительной оси, обязательно пересекается с зонами линейных фононов. В результате этого они должны излучать энергию в виде эмиссии фононов до тех пор пока решение не станет периодическим по времени или не исчезнет. Начальный метод Макайя и Обри [374] доказательства существования дискретных бризеров работает вблизи

предела называемого антиконтинуальным, в котором система распадается на массив невзаимодействующих ангармонических осцилляторов и где существование локальных мод является тривиальным местом. Тогда, теорема о неявной функции может быть использована для доказательства того, что такое точное решение сохраняется, когда ангармонические осцилляторы оказываются связанными. Имеется несколько способов для определения антиконтинуального предела данной модели. Эти модели могут разделены на два класса. Первый класс включает только оптические моды с фононной щелью. Второй класс, являющийся более естественным для реальных материалов, включает акустические фононы.

В качестве примера первого класса мы рассмотрим общую форму цепочки Клейна-Гордона

$$\frac{d^2 u_n}{dt^2} - g(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) + V'_{\text{sub}}(u_n) = 0, \quad (4.25)$$

где атомы со скалярными координатами u_n и единичной массой находятся под действием потенциала подложки $V_{\text{sub}}(u)$ с нулевым минимумом при $u = 0$ и взаимодействуют со своими ближайшими соседями с постоянной взаимодействия g .

Для малых смещений u этот потенциал можно разложить в ряд $V_{\text{sub}}(u) = \frac{1}{2}u^2 + \dots$ и легко найти, что частота линейного фонона с волновым вектором q есть $\omega(q) = \sqrt{1 + 4g \sin^2(q/2)}$. Эти частоты образуют фононный спектр занимающий интервал $[1, \sqrt{1 + 4g}]$ и имеющий щель $[0, 1]$ (мы предполагаем, что нормализованная частота щели $\omega_0 = 1$). Антиконтинуальный предел для этой модели получается при $g = 0$, когда ангармонические осцилляторы не связаны друг с другом. Тогда движение каждого осциллятора будет периодическим, с частотой $\omega(I)$ зависящей от его амплитуды или, что эквивалентно, от его действия I [которым является область внутри замкнутого контура в фазовом пространстве $(u, \dot{u})$]. Таким образом, мы в общем имеем $d\omega(I)/dI \neq 0$.

Существуют тривиальные бризерные решения в антиконтинуальном пределе соответствующие, например, одному осциллятору колеблющемуся на частоте ω_{br} , в то время как остальные осцилляторы остаются неподвижными. Слабое взаимодействие между соседними частицами ведет к расширению моды на несколько ячеек (см. рис. 4.12). В зависимости от знака, нелинейность может обеспечивать существование пространственно локализованных периодических по времени состояний (бризеров) с частотами вне спектра линейных колебаний, как это показано на рис. 4.12 для случая модели ϕ^4 с потенциалом $V_{\text{sub}}(u) = -\frac{1}{2}u^2 + \frac{1}{4}u^4$, где щелевая частота $\omega_0 = \sqrt{2}$. Представим условия для образования дискретного бризера только в низу, в щели $\omega_{\text{br}} < \sqrt{2}$. Этого можно достичь, например, возбудив колебание только одного из нелинейных осцилляторов с довольно малой амплитудой, такой чтобы его частота была меньше наименьшей допустимой линейной частоты. Тогда, если взаимодействие между ячейками достаточно слабо, то не только основная частота этой моды ω_{br} будет лежать ниже щели, но и все гармоники этой частоты будут лежать выше ее. Следовательно, здесь не будет возможности (линейного) взаимодействия с протяженными модами, даже в пределе бесконечной системы, когда спектр $\omega(q)$ становится плотным. Это означает, что бризер не сможет разрушаться из-за излучения линейных волн (фононов) и, следовательно, будет (линейно) устойчив.

В случае, когда $n\omega_{\text{br}} \neq 1$ для любого целого n , т.е., когда частота бризера и все ее гармоники не равны вырожденной фононной частоте $\omega(q)$ при $q = 0$, теорема о неявной функции может быть использована для доказательства, в строгом математическом смысле, что это решение сохранится для некоторого ненулевого взаимодействия g как бризерное решение с частотой ω_{br} [374]. Более того, даже в сложных моделях с антиконтинуальным пределом можно легко доказать существование дискретных бризеров вблизи этого предела [383]–[385].

Однако, модели второго класса с акустическими фононами создают трудности, так как здесь фононный спектр содержит частоту $\omega(q) = 0$. Следовательно, $n\omega_{\text{br}}$ всегда принадлежит этому фононному спектру при $n = 0$. Однако, Обри [386] было показано, что в моделях молекулярного кристалла с гармоническими акустическими фононами и ненулевой скоростью звука, резонансное взаимодействие между бризерными гармониками при $n = 0$ и акустическими фононами становится безопасным и бризер сохраняется в связанной системе.

4.4.3 Дискретное уравнение НШ

Дискретная модель

Несмотря на то, что дискретное нелинейное уравнение Шредингера (НУШ) не описывает все свойства дискретных бризеров в нелинейных решетках при наличии потенциала подложки, оно служит фундаментальной моделью имеющей много приложений и позволяет изучить многие фундаментальные проблемы связанные с динамикой дискретных бризеров.

Для построения дискретной модели, мы рассмотрим динамику одномерной ФК цепочки с потенциалом подложки общей формы. Учитывая, что амплитуды мод относительно малы, мы разложим потенциал подложки, сохраняя нелинейные члены низких порядков. Для стандартной ФК модели коэффициент α , стоящий перед

кубическим членом, равен нулю в силу симметрии потенциала, но ниже мы рассмотрим более общий случай (это позволит, например, рассмотреть ситуацию, когда цепочка ФК находится под действием малого постоянного поля). Обозначив через $u_n(t)$ смещение n -ой частицы мы будем иметь уравнение движения

$$\frac{d^2 u_n}{dt^2} - g(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) + \omega_0^2 u_n + \alpha u_n^2 + \beta u_n^3 = 0, \quad (4.26)$$

где g – постоянная взаимодействия, ω_0 – частота мало-амплитудных колебаний в потенциале подложки, α и β – параметры ангармонизма потенциала. Линейные волны с частотой ω и с волновым числом k описываются дисперсионным соотношением

$$\omega^2 = \omega_0^2 + 4g \sin^2 \left(\frac{ka_s}{2} \right), \quad (4.27)$$

где a_s – шаг решетки. Как видно из уравнения (4.27), линейный спектр имеет щелевую частоту ω_0 и в силу дискретности ограничен сверху частотой обрезания $\omega_{\max} = (\omega_0^2 + 4g)^{1/2}$.

Анализируя медленное временное изменение волнового пакета, мы попытаемся *полностью* сохранить дискретность первичной модели. В действительности, это возможно только при условии $\omega_0^2 \gg g$, т.е. когда слаба сила взаимодействия между соседними частицами. Ища решение в форме

$$u_n = \phi_n + \psi_n e^{-i\omega_0 t} + \psi_n^* e^{i\omega_0 t} + \xi_n e^{-2i\omega_0 t} + \xi_n^* e^{2i\omega_0 t} + \dots, \quad (4.28)$$

мы принимаем следующие соотношения (подобно континуальному случаю, см., например, работу [314]): $\phi_n \sim \epsilon^2$, $\xi_n \sim \epsilon^2$, $\psi_n \sim \epsilon$, а также следующие соотношения между параметрами модели $g \sim \epsilon^2$, $\omega_0^2, \alpha, \beta \sim 1$, $(d/dt) \sim \epsilon^2$. Ясно что этот выбор параметров соответствует большим значениям ω_0^2 (мы можем просто разделить все члены на значение частоты щели).

Подставляя уравнение (4.28) в уравнение (4.26) и сохраняя только члены младшего порядка по ϵ , мы получим уравнение для ψ_n ,

$$2i\omega_0 \frac{d\psi_n}{dt} + g(\psi_{n+1} + \psi_{n-1} - 2\psi_n) - 2\alpha(\phi_n \psi_n + \psi_n^* \xi_n) - 3\beta |\psi_n|^2 \psi_n = 0, \quad (4.29)$$

и два алгебраических соотношения для ϕ_n и ξ_n ,

$$\phi_n \approx -\frac{2\alpha}{\omega_0^2} |\psi_n|^2, \quad \xi_n \approx \frac{\alpha}{3\omega_0^2} \psi_n^2. \quad (4.30)$$

Результаты (4.29) и (4.30) являются обобщениями хорошо известных соотношений в континуальном случае [314]. Таким образом, конечное дискретное уравнение НШ принимает вид

$$i \frac{d\psi_n}{dt} + K(\psi_{n+1} + \psi_{n-1} - 2\psi_n) + \lambda |\psi_n|^2 \psi_n = 0, \quad (4.31)$$

где $K = g/2\omega_0$, $\lambda = [(10\alpha^2/3\omega_0^2) - 3\beta]/2\omega_0$. Уравнение (4.31) используется ниже для анализа различных типов локализованных мод в ФК цепочке. В действительности, дискретное уравнение НШ (4.31), также известное как дискретное уравнение самолокализации [387, 388], как хорошо известно имеет многочисленные физические приложения. Оно описывает явление самолокализации в моделях теории поля, от самозахвата колебательных мод в природных и синтетических биомолекулах [387, 389] до динамики линейных массивов вихрей, являясь специальным пределом дискретного уравнения Гинзбурга-Ландау [390]. Обобщенная версия дискретного уравнения НШ с произвольной степенью нелинейности была также рассмотрена для изучения влияния нелинейности на структуру и устойчивость локализованных мод (см., например, ссылки [391]–[395]). Мы хотим обратить внимание, что в настоящем контексте уравнение (4.31) появляется как приближенное уравнение при предположении о медленном (временном) изменении волновых пакетов и пренебрежении гармониками высокого порядка. Последнее означает, что мы предполагаем, что частота щели ω_0 является большой относительно остальных частот в системе, т.е. $\omega_0^2 \gg 4g$ и $\omega_0^2 \gg \alpha u_0, \beta u_0^2$, где u_0 является амплитудной волны. Первое неравенство выполняется для слабо дисперсионных систем в которых частота ω_0 близка к $\omega_{\max}$, в то время как последнее неравенство означает, что нелинейность потенциала подложки не является большой. Все это являются обычными условиями для получения уравнения НШ. В решетке, однако, условие $\omega_0^2 \gg 4g$ означает также, что здесь эффекты дискретности являются сильным обоснованием для интереса к дискретным модам локализованным на нескольких частицах.

Модуляционная неустойчивость

Дискретное уравнение НШ (4.31) позволяет легко анализировать модуляционную неустойчивость мод с постоянной амплитудой. Как хорошо известно, нелинейные физические системы могут демонстрировать неустойчивость,

которая ведет к самопроизвольной модуляции устойчивых состояний в результате взаимодействия эффектов нелинейности и дисперсии. Это явление, известное как модуляционная неустойчивость, было исследовано в континуальных (см., например, ссылки [396]–[399]) и дискретных [400] моделях. Как было отмечено, модуляционная неустойчивость ответственна за локализацию энергии и образование локализованных мод.

Для дискретного уравнения НШ (4.31), полученного в одно-частотном приближении, модуляционная неустойчивость может быть легко проанализирована. Уравнение (4.31) имеет точное непрерывное волновое решение

$$\psi_n(t) = \psi_0 e^{i\theta_n} \quad \text{with} \quad \theta_n = ka_s n - \omega t, \quad (4.32)$$

где частота ω подчиняется *нелинейному* дисперсионному соотношению

$$\omega = 4K \sin^2 \left(\frac{ka_s}{2} \right) - \lambda \psi_0^2. \quad (4.33)$$

Линейная устойчивость волны (4.32), (4.33) может быть исследована путем линеаризации уравнения в виде $\psi_n(t) = (\psi_0 + b_n) \exp(i\theta_n + i\chi_n)$, где $b_n = b_n(t)$ и $\chi_n = \chi_n(t)$ предполагаются малыми по сравнению с параметрами несущей волны. В линейном приближении два связанных уравнения для этих функций определяют дисперсионное соотношение

$$[\Omega - 2K \sin(Qa_s) \sin(ka_s)]^2 = 4K \sin^2(Qa_s/2) \cos(ka_s) [4K \sin^2(Qa_s/2) \cos(ka_s) - 2\lambda \psi_0^2] \quad (4.34)$$

для волнового числа Q и частоты Ω линейных волн модуляции. В длинноволновом пределе, когда $Qa_s \ll 1$ и $ka_s \ll 1$, уравнение (4.34) сводится к обычному выражению полученному для континуального уравнения НШ [397].

Уравнение (4.34) определяет условие для устойчивости в решетке плоской волны с волновым числом k . В противоположность тому, что было найдено в континуальном пределе, теперь устойчивость зависит от k . Область неустойчивости появляется только если [400]

$$\lambda \cos(ka_s) > 0. \quad (4.35)$$

Для положительного λ и взятого k , т.е. $k < \pi/2a_s$, плоская волна будет *неустойчивой* к модуляциям во всей этой области при условии $\psi_0^2 > 2K/\lambda$. Устойчивость плоско-волнового решения к модуляциям параметров волны позволяет сделать заключение о возможных типах нелинейных локализованных мод, которые могут существовать в цепочке.

Модуляционная неустойчивость может быть эффективным методом генерирования локализованных мод в дискретных решетках, так как дискретность решетки радикально изменяет условие устойчивости. Дамонт с соавторами [401] проанализировали, следуя предложенной Кившарем и Пейраром технике [400], модуляционную неустойчивость линейных волн в присутствии шума в решетке с кубическим и квартетным потенциалом подложки. Они показали, что модуляционная неустойчивость является первым шагом локализации энергии (см. также ссылку [402] для случая деформируемой дискретной модели НШ).

Пространственно локализованные моды

Как упоминалось выше, одним из основных эффектов модуляционной неустойчивости является появление локализованных мод (см., например, [403]). В данном случае, это означает, что для $\lambda > 0$ область малых k неустойчива и, следовательно, неустойчивость может вести к образованию локализованных мод с частотами лежащими *ниже* нелинейной зоны спектра (4.33). Такую локализованную моду можно найти в точной форме из уравнения НШ (4.31) следуя методу Пэйджа [352]. Ища стационарные решения уравнения (4.31) в форме $\psi_n(t) = A f_n e^{-i\omega t}$, мы получим набор связанных алгебраических уравнений для действительных функций f_n ,

$$\omega f_n + K(f_{n+1} + f_{n-1} - 2f_n) + \lambda A^2 f_n^3 = 0. \quad (4.36)$$

Мы ищем сейчас два типа строго локализованных решений уравнения (4.36), которые имеют центры *на* и *между* центрами частиц. Вначале, предположим, что мода имеет центр на ячейке $n = 0$ и возьмем $f_0 = 1$, $f_{-n} = f_n$, $|f_n| \ll f_1$ для $|n| > 1$. Простые вычисления приводят к образцу так называемых “А-мод” (левая нижняя мода на рис. 4.12),

$$\psi_n^{(A)}(t) = A(\dots, 0, \xi_1, 1, \xi_1, 0, \dots) e^{-i\omega t}, \quad (4.37)$$

где предполагается, что параметр $\xi_1 = K/\lambda A^2$ является малым (т.е., члены порядка ξ_1^2 опущены). Частота ω в уравнении (4.37) равна $\omega = -\lambda A^2$ и она действительно лежит ниже наименьшей частоты зоны.

Второй тип локализованных мод, “ B -моды”, могут быть найдены в предположении, что колебания моды расположены симметрично между двумя соседними частицами (правая нижняя мода на рис. 4.12),

$$\psi_n^{(B)}(t) = B(\dots, 0, \xi_2, 1, 1, \xi_2, 0, \dots) e^{-i\omega t}, \quad (4.38)$$

где значения ω и ξ_2 задаются как $\xi_2 = K/\lambda B^2$ и $\omega = -\lambda B^2$.

Вычисление эффективного ПН потенциала для локализованной моды является более сложной задачей чем для кинков, так как локализованные моды имеют больше параметров и ПН потенциальный рельеф нельзя строго определить [404]. Однако, можно легко показать существование некоторого типа ПН потенциала, оказывающего влияние на движение нелинейных локализованных мод вдоль решетки. Вначале, следуя работе Кившаря и Кэмпбела [381], мы можем представить локализованную волну *фиксированной формы* двигающуюся по решетке без изменения формы. Тогда, ясно, что “ A ” форма возникает когда центр пика приходится на узел решетки, а форма “ B ” – когда центр пика находится ровно посередине между узлами. Это наблюдение заставляет провести сравнение энергий этих двух мод для случая НУШ с сохранением интеграла движения $N = \sum_n |\psi_n|^2$. Такое сравнение интегралов N , вычисленных для A - и B -мод, дает соотношение между амплитудами A и B в наименьшем порядке малого параметра ξ_1 и ξ_2 , $A^2 = 2B^2$. С этим условием на A и B , мы можем теперь интерпретировать эти две моды как стационарные состояния *той же самой* локализованной моды. Вычислив разницу энергий между этими двумя стационарными состояниями мы получим $\Delta E_{AB} = E_A - E_B = -\frac{1}{2}\lambda A^4 + \lambda B^4 = -\frac{1}{4}\lambda A^4$.

Из этой простой оценки можно сделать важное заключение, что здесь существует эффективный энергетический барьер (высота эффективного ПН потенциала) между двумя стационарными состояниями дискретного уравнения НШ. Также это значит, что любое движение нелинейной локализованной моды вдоль цепочки будет сопровождаться влиянием периодического энергетического рельефа. В частности, локализованная мода может быть *захвачена* потенциалом (т.е. захвачена дискретностью решетки). Простейший способ промоделировать это явление, это “толкнуть” локализованную моду для того чтобы она начала двигаться по решетке, изменив начальную фазу моды [405]. В-мода, соответствующая максимуму потенциала, практически сразу начинает двигаться. Понятно, что для движения вдоль цепочки нужно преодолеть некоторый энергетический барьер [405]. Все это является косвенным проявлением эффективного барьера обусловленного дискретностью решетки, несмотря на то, что его не возможно определить строгим способом.

Нужно отметить, что представленный выше анализ частично относится к свойствам устойчивости нелинейных локализованных мод: стационарная локализованная мода соответствующая локальному *максимуму* ПН потенциала должно проявлять неустойчивость, в то время как мода соответствующая *минимуму* должна быть устойчивой. Это качественное наблюдение находится в хорошем согласии с работой by Сандуски и др. [360], которые показали численно и аналитически (используя другие аргументы, не ссылающиеся на ПН потенциал) что, в случае межатомного квартетного ангармонизма локализованная мода СТ (левая верхняя мода на рис. 4.12) в действительности является неустойчивой, но П мода (правая верхняя мода на рис. 4.12) является чрезвычайно устойчивой.

Простейший способ вычисления формы ПН потенциала в случае уравнения НШ состоит в использовании интегрируемой версии решеточного уравнения, т.е. Абловиц-Ладик (AL) модели [406], и учесть разность между этими двумя моделями как возмущение (см. также ссылки [234, 382, 407], где возмущенная AL цепочка была рассмотрена как новая важная физическая модель). Для того чтобы сделать это мы представим первоначальную дискретное уравнение НШ (4.31) в форме

$$i \frac{d\psi_n}{dt} + K(\psi_{n+1} + \psi_{n-1} - 2\psi_n) + \frac{1}{2}\lambda(\psi_{n+1} + \psi_{n-1})|\psi_n|^2 = R(\psi_n), \quad (4.39)$$

где

$$R(\psi_n) = \frac{1}{2}\lambda |\psi_n|^2 (\psi_{n+1} + \psi_{n-1} - 2\psi_n). \quad (4.40)$$

Мы начнем с точного решения AL модели (Абловиц и Ладик, 1976) для невозмущенного случая ($R = 0$), которое мы представим в форме

$$\psi_n(t) = \frac{\sinh \mu \exp[i\nu(n - x_0) + i\alpha]}{\cosh[\mu(n - x_0)]}, \quad (4.41)$$

где $d\mu/dt = 0$, $d\nu/dt = 0$, $dx_0/dt = (2/\mu) \sinh \mu \sin \nu$, и $d\alpha/dt = 2[\cosh \mu \cos \nu - 1]$. В уравнении (4.41) и в последующих вычислениях связанных с уравнениями (4.39), (4.40) мы используем нормализованные переменные $t \rightarrow t/K$ и $|\psi_n|^2 \rightarrow (2K/\lambda)|\psi_n|^2$.

Рассмотрев теперь правую сторону уравнения (4.39) как возмущение (что конечно справедливо для не слишком сильно локализованных мод) мы можем использовать теорию возмущения основанную на обратном преобразовании рассеяния [27]. Для случая AL модели, соответствующая версия теории возмущения солитонов была детально разработана Вахненко и Гадидеем [408]. Согласно этому подходу, параметры локализованного

решения (4.41), т.е. μ , ν , α и x_0 считаются медленно меняющимися во времени. Уравнения описывающие их изменение в присутствии возмущений было получено Вахненко и Гадидеем [408]. Подставляя уравнение (4.40) в эти уравнения и применяя формулу Пуассона для вычисления сумм, появляющихся как результат дискретности первичной AL модели, мы получим два связанных уравнения для параметров солитона ν и x_0 :

$$\frac{dx_0}{dt} = \frac{2}{\mu} \sinh \mu \sin \nu, \quad (4.42)$$

$$\frac{d\nu}{dt} = -\frac{2\pi^3 \sinh^2 \mu \sin(2\pi x_0)}{\mu^3 \sinh(\pi^2/\mu)}, \quad (4.43)$$

а также $d\mu/dt = 0$. В уравнении (4.43) мы учли только вклад первых гармоник, так как старшие гармоники, порядка s , будут всегда появляться с дополнительным множителем $\sim \exp(-\pi^2 s/\mu)$, который, как предполагается, является малым.

Система (4.42)–(4.43) является гамильтоновой, соответствующий гамильтониан задается выражением

$$H = -\frac{2}{\mu} \sinh \mu \cos \nu - \frac{\pi^2 \sinh^2 \mu}{\mu^3} \frac{\cos(2\pi x_0)}{\sinh(\pi^2/\mu)}, \quad (4.44)$$

где параметры x_0 и ν имеют смысл обобщенных координаты и момента, соответственно. Первый член является кинетической энергией эффективной частицы, второй – периодическим потенциалом, который по существу является эффективным периодическим ПН рельефом. При условии, что разница между двумя моделями мала, т.е. если параметр μ мал, амплитуда ПН потенциала, определенная как

$$U_{\max} = \frac{\pi^2 \sinh^2 \mu}{\mu^3 \sinh(\pi^2/\mu)}, \quad (4.45)$$

экспоненциально мала относительно параметра μ^{-1} . Как мы можем видеть, зависимость (4.45) и периодический потенциал $U_{\max} \cos(2\pi x_0)$ подобны зависимости и потенциалу в задаче для топологических кинков в обсужденной выше ФК модели. В результате этого, все типы движения эффективных частиц остаются такими же как и в случае кинка, в частности, нелинейная мода может быть захвачена дискретностью подобно пинингованному кинку.

Подход основанный на возмущениях интегрируемой AL решетки был проверен Бангом и Пейраром [315]. Они нашли только качественное согласие с результатами численных исследований нелинейных локализованных мод в обобщенных ФК моделях. Одной из возможных причин этого является сильное допущение при дифференцировании алгебраических уравнений (4.42) и (4.43), которые выполняются только в случае очень малых возмущений. В общем случае, все высоко-частотные гармоники в Пуассоновских суммах дают вклад того же порядка и поэтому количественного совпадения не следует ожидать. Однако, теория основанная на AL модели может быть полезной как простой пример объяснения, как из-за дискретности решетки появляется эффективная зависимость параметров моды, когда модель решетки становится неинтегрируемой.

4.4.4 Темные бризеры

Как хорошо известно в континуальном предельном приближении дискретное НУШ (4.31) имеет два различных типа солитонных решений, *светлые* и *темные* солитоны. Светлые солитоны подобны обсужденным выше пространственно локализованным модам, в то время локализованные структуры, подобные темным солитонам, гораздо меньше обсуждены в литературе. Целью этого параграфа представить, следуя работе Кившаря [409] (см. также ссылки [410]–[412]) два типа таких структур для ФК-подобной решетки. Такие типы структур наблюдались экспериментально Денардо и др. [413] в цепочке параметрически управляемых маятников (см. также работу [414] для случая диатомной решетки). Аналогичные типы темно-солитонных локализованных мод для цепочки с ангармоническим межатомным взаимодействием были также проанализированы Бортолани с соавторами [415].

Заметим в начале, что для положительного λ , непрерывное волновое решение устойчиво только для $k > \pi/2a_s$, так что темно-профильные структуры возможны, например, вблизи максимальной частоты $\omega_m = 4K$. Подставляя $\psi_n = (-1)^n \Psi(x, t) e^{i\omega_m t}$ в уравнение (4.31), в котором медленно изменяющийся огибающая Ψ может быть найдена как решение непрерывного НУШ. В континуальном приближении легко получить темно-солитонное решение

$$\psi_n = (-1)^n A \tanh(Ax) e^{-i\Omega t}, \quad (4.46)$$

где $\Omega = 4K - \lambda A^2$ и $x = na_s \sqrt{K}$ рассмотрены как непрерывные переменные.

Ища теперь подобные структуры для дискретного НУШ (4.31), мы обнаружим, что они тоже возможны, например, в форме

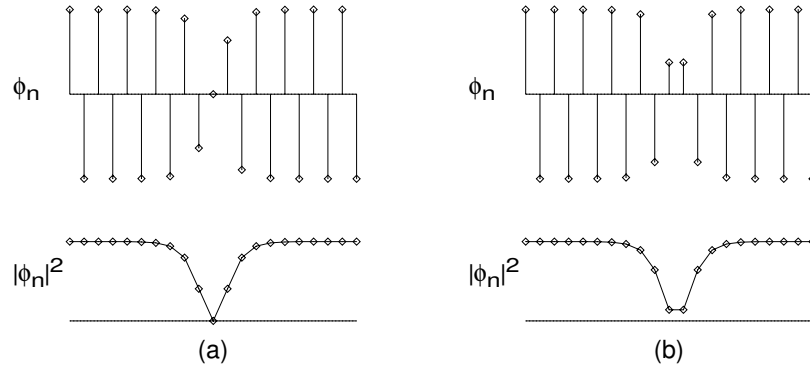


Рис. 4.13. Два типа “чередующихся” темно-солитонных мод решетки. Показаны амплитуды колебаний для каждой ячейки (верхняя линия) и значения $|\psi_n|^2$ (нижняя линия) [416].

$$\psi_n = A e^{-i\Omega t} (\dots, 1, -1, 1, -\xi_1, 0, \xi_1, -1, 1, \dots), \quad (4.47)$$

где $\Omega = 4K - \lambda A^2$ и $\xi_1 = 1 - \Delta_1$, $\Delta_1 = K/\lambda A^2 \ll 1$. Структура (4.47) является солитоном уравнения НУШ с хорошей точностью для малых Δ_1 . Она является возбуждением типа фазового кинка, локализованным на нескольких частицах решетки [см. Рис. 4.13(a)]. Так как частота Ω совпадает с максимальной частотой нелинейного спектра, мы назовем эти солитоны “краевыми кинками”.

Темно-солитонные моды, представленные на рис. 4.13(a) и 4.13(b) описывают два типа стационарных “темных” солитонов в дискретной решетке. Одна мода (А-мода) имеет центр с нулевой интенсивностью на узле решетки, другая мода (В-мода) имеет центр посередине между двумя узлами. Эти две моды можно всегда найти в интервале от непрерывного предела ($g \rightarrow \infty$) до антиконтинуального предела ($g \rightarrow 0$). При $g \rightarrow 0$, А-мода описывает единственную “дыру” в несущей волне постоянной амплитуды, со сдвигом на π фазы волны при пересечении этой дыры. Аналогично, В-мода описывает колебательную моду решетки с фазовым сдвигом на π между двумя соседними ячейками, а не в дыре.

Йохансон и Кившарь [416] изучили темные бризеры и их устойчивость в дискретном уравнении НШ и описали осцилляционную неустойчивость темных солитонов. Они нашли критическое значение постоянной взаимодействия решетки g , $g_{cr} \approx 0.07647$, которая определяет область устойчивости. При $g = g_{cr}$ происходит бифуркация Хопфа, при которой пара сопряженных комплексных значений покидает мнимую ось и уходит в комплексную плоскость. Таким образом, осцилляционная неустойчивость происходит для А-моды при $g > g_{cr}$, неустойчивость растет пропорционально действительной части неустойчивого собственного значения. Для В-моды, при $g = 0$ все собственные значения лежат в нуле. Как только параметр g возрастает, одна пара выходит на действительную ось и дальше остается здесь для всех $g > 0$. Поэтому, В-мода всегда является неустойчивой. Эта неустойчивость появляется из-за врожденной дискретности модели нелинейной решетки. Универсальность сценария появления неустойчивости предполагает, что она имеет место и в других нелинейных моделях, допускающих существование темных солитонов. Наблюдаемая здесь неустойчивость может быть рассмотрена как некоторое расширение неустойчивостей имеющих место в малых решетках [387, 388].

Другой тип темно-профильных нелинейных локализованных структур, который можно также описать аналитически как для непрерывной, так и для дискретной модели, реализуется в случае когда частота моды находится ровно посередине зоны спектра, т.е. когда волновое число равно $\pi/2a_s$. В этом случае мы можем разделить частицы в цепочке на два подмножества, на частицы с четными и на частицы с нечетными номерами, и затем отдельно описать их динамику введя новые переменные, положив $\psi_n = v_n$, для $n = 2l$ и $\psi_n = w_n$, для $n = 2l + 1$. Основной идеей такого подхода является использование непрерывного приближения для *двух* волновых пакетов v_n и w_n [409].

Для поиска решений в окрестности точки $k = \pi/2a_s$ мы можем использовать следующий анзац

$$v_{2l} = (-1)^l V(2l, t) e^{-i\omega_1 t}, \quad w_{2l+1} = (-1)^l W(2l + 1, t) e^{-i\omega_1 t}, \quad (4.48)$$

где $\omega_1 = 2K$ является частотой четырех-частичной линейной моды. Здесь мы предположили, что функции $V(2l, t)$ и $W(2l + 1, t)$ плавно изменяются в пространстве. Подставив уравнение (4.48) в уравнение (4.31), мы получим систему двух связанных уравнений

$$i \frac{\partial V}{\partial t} + 2a_s K \frac{\partial W}{\partial x} + \lambda |V|^2 V = 0, \quad (4.49)$$

$$i\frac{\partial W}{\partial t} - 2a_s K \frac{\partial V}{\partial x} + \lambda|W|^2 W = 0, \quad (4.50)$$

где переменная x уже является континуальной. Для анализа локализованных структур мы будем искать стационарные решения уравнений (4.49) и (4.50) в форме $(V, W) \propto (f_1, f_2)e^{i\Omega t}$ предположив, для простоты, что f_1 и f_2 являются действительными функциями. Тогда, стационарные решения уравнений (4.49) и (4.50) будут описываться системой двух обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка

$$\frac{df_1}{dz} = -\Omega f_2 + \lambda f_2^3, \quad (4.51)$$

$$\frac{df_2}{dz} = \Omega f_1 - \lambda f_1^3, \quad (4.52)$$

где $z = x/2a_s K$. Уравнения (4.51), (4.52) описывают динамику гамильтоновой системы с одной степенью свободы с сохраняющейся энергией $E = -\frac{1}{2}\Omega(f_1^2 + f_2^2) + \frac{1}{4}\lambda(f_1^4 + f_2^4)$. Это систему можно легко проинтегрировать с помощью вспомогательной функции $\phi = (f_1/f_2)$, для которой выполняется следующее уравнение

$$\left(\frac{d\phi}{dz}\right)^2 = \omega_1^2 \Omega^2 (1 + \phi^2)^2 + 4\lambda E (1 + \phi^4). \quad (4.53)$$

Различным значениям энергии E соответствуют различные типы решений уравнения (4.53) [409]. Солитонным решениям на фазовой плоскости (f_1, f_2) соответствуют сепаратрисы связывающие пару соседних седловых точек $(0, f_0)$, $(0, -f_0)$, $(f_0, 0)$, или $(-f_0, 0)$, где $f_0^2 = \Omega/\lambda$. Найдя значение E соответствующее этим сепаратрисным решениям $E = -\Omega^2/4\lambda$ можно проинтегрировать в элементарных функциях уравнение (4.53) и получить солитонное решение

$$\phi(z) = \exp(\pm\sqrt{2}\Omega z), \quad (4.54)$$

$$f_2^2 = \frac{\Omega e^{\mp\sqrt{2}\Omega z} [2 \cosh(\sqrt{2}\Omega z) \pm \sqrt{2}]}{2\lambda \cosh(2\sqrt{2}\Omega z)}, \quad f_1 = \phi f_2. \quad (4.55)$$

Решения (4.54), (4.55) с отрицательной Ω существуют также для дефокусирующей нелинейности, когда $\lambda < 0$.

Эти результаты дают профили локализованных структур в дискретной нелинейной решетке. Дырочные локализованные структуры представлены двумя кинками в нечетных и четных колебательных модах, которые на бесконечности имеют противоположные полярности.

Можно также найти сильно локализованные нелинейные структуры в решетке соответствующие решениям (4.54), (4.55) в следующей форме $\psi_n = Ae^{-i\Omega t}(\dots, 1, 0, -1, 0, \xi_2, \xi_2, 0, -1, 0, 1, \dots)$, где $\Omega = 2K - \lambda A^2$ – частота на середине нелинейного спектра, а $\xi_2 = 1 - \Delta_2$, $\Delta_2 = K/2\lambda A^2 \ll 1$. Это приближение является наилучшим для малых значений параметра Δ_2 .

4.4.5 Ротобризеры

Нелинейные локализованные моды состоят не только из колебательных мод. Такено и Пейрар [369] показали существование в цепочке связанных ротаторов так-называемых *ротационных мод* в которых центральный ротатор осуществляет монотонно возрастающее вращение, в то время как соседние совершают только колебания у своих положений равновесия. В фазовом пространстве системы, движение центральной узла и движение соседних лежат на противоположных сторонах от сепаратрисы. В результате этого моды вращения являются *внутренне дискретными*.

Однако, в силу специфики мод вращения, получить аналитическое решение здесь намного сложнее чем для колебательных мод, так как характер движение центральной ячейки качественно отличается от характера движения других ячеек. Это препятствует использованию любого континуального предела, для описания динамики разных ячеек должны быть использованы разные функции. Такено и Пейрар [369] показали, как можно получить приближенное решение. Численные проверки подтвердили, что это решение является достаточно хорошим, так как оно учитывает внутреннюю дискретность решетки. Позже они привели решение основанное на функции Грина решетки [417]. Численное решение, которое получается из аналитического выражения даваемого функцией Грина, немного лучше чем предыдущее, но более важно, что этот метод не ограничен только одномерными решетками, его можно легко формально расширить на случай двух и трех размерностей.

Модель связанных ротаторов можно записать в следующей форме

$$\ddot{u}_n + g \sin u_n = J[\sin(u_{n+1} - u_n) - \sin(u_n - u_{n-1})], \quad (4.56)$$

где u_n – полевая переменная связанная с n -ой ячейкой решетки, а J – постоянная. Этот набор уравнений описывает динамику цепочки связанных маятников или молекул в пластическом кристалле.

Мы ищем частное решение уравнения (4.56) в котором один ротатор (скажем, $n = 0$) совершает вращательное движение, в то время как все остальные совершают колебательные движения. Это значит, что $|u_0| \gg |u_n|$ для $n \geq 1$, и мы можем предположить, что высоко-амплитудное движение центральной ячейки с $n = 0$ не возмущается малыми колебаниями соседних ячеек. Центральный ротатор описывается уравнением

$$\ddot{u}_0 + \omega_0^2 \sin u_0 = 0, \quad (4.57)$$

где $\omega_0 = \sqrt{g + 2J}$, и его решение описывающее вращение с частотой Ω имеет форму $u_0(t) = 2\text{am}[(\Omega/2)t, k]$, где k – модуль эллиптической функции Якоби, $k < 2\omega_0/\Omega < 1$. Связывание этого вращения с движением соседних ячеек позволяет построить моду в которой центральный ротатор осуществляет монотонно растущее вращение, в то время как его соседи только колеблются около своих положений равновесия. Численное моделирование показывает, что довольно точное выражения для вращающихся мод может быть получено при помощи метода использующего функцию Грина решетки. Начальный шаг метода – линейаризация уравнений для ячеек вне местонахождения ротатора, совершающего непрерывное вращение. Это приближение оправдано качественной разностью между движением центра и движением остальных ячеек, а также малой амплитудой колебаний этих внешних ячеек, даже в случае довольно сильного взаимодействия.

Не существует гладкого перехода от полного вращения к колебанию. Теорема Макайя и Обри [374] может быть расширена для того, чтобы показать, что моды вращения являются точными решениями системы уравнений движения связанных ротаторов. Исследование термализации решетки ротаторов [369] показывает, что подобно бризерам, моды вращения тоже могут возбуждаться тепловыми колебаниями. При этом, если очень легко термически активируются моды вращения включающие один или несколько ячеек, то нелокализованные моды вращения не наблюдаются до достижения очень высоких температур, так как они имеют очень большие энергии. Это резко контрастирует с колебательными модами, нелокализованные дубликаты которых, т.е. волны колебаний или фононы, легко находятся в термализованной цепочке.

4.5 Двухмерные бризеры

Хотя в основном методология бризеров и соответствующие теоретические методы были развиты для случая одномерного пространства, есть несколько исследований высоко-размерных систем. Здесь наиболее важно то, что строгое доказательство существования бризеров в высоко-размерных нелинейных решетках применимо для случая произвольной размерности. Также были опубликованы результаты численных исследований для нескольких простых нелинейных решеток, например, таких как двухмерная решетка Ферми-Паста-Улама [418]–[420], решетка Клейн-Гордона [421]–[422], а также для дискретных НШ систем [423]–[425]. Также были исследованы и системы большей размерности [426].

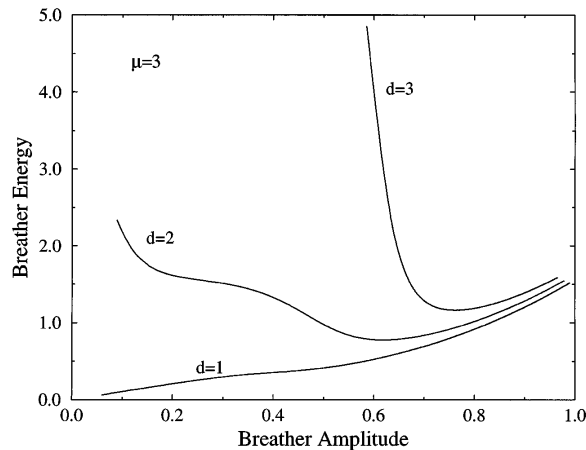


Рис. 4.14. Зависимости энергии бризера от амплитуды для d -мерной дискретной системы НШ для различных размерностей решетки. Размер системы $N = 100$, $N = 25^2$, $N = 31^3$ для $d = 1, 2, 3$, соответственно [424].

Дискретные бризеры являются периодическими по времени, пространственно локализованными решениями уравнений движения для классических степеней свободы решетки. Несмотря на то, что их существование и физический источник не зависят существенно от размерности решетки, их свойства, такие как энергии возбуждения и устойчивость, отличны в системах с разными размерностями. Флах и др. [424] первыми провели исследование энергетических свойств (одно-параметрического) семейства бризеров в одно-, двух- и трех-мерных

решетках. Взяв для примера d -мерную дискретную модель НШ, они показали, что энергия бризера имеет положительную нижнюю границу если размерность данной нелинейной решетки больше или равна некоторому критическому значению. В частности, они оценили энергию бризера как $E_{br} \sim A_0^{(4-d)/2}$, где A_0 – амплитуда бризера, d – размерность решетки, а z – мощность нелинейности. Так, для $d > d_c = 4/z$, энергия бризера расходится для малых амплитуд, так что здесь в системе существует порог для энергии бризера (см. рис. 4.14). Это заключение очень важно для экспериментального обнаружения дискретных бризеров.

Кеврекидис с соавторами [425] разработали методологию конструирования двухмерных дискретных бризеров. Применение ее к дискретному уравнению НШ показало, что квадратная решетка допускает существование *трех разных типов бризеров*. Рассмотрение элементарной ячейки показало, что наиболее неустойчивой является мода с центром внутри ячейки, мода с центром на вершине ячейки является наиболее устойчивой, в то время как промежуточные моды с центрами на гранях ячейки являются также неустойчивыми. Таким образом, интересное отличие между одномерным и двухмерным случаем проявляются как через существование гибридной моды, так и через большую сложность сценария устойчивости. Эта картина была описана с использованием языка теории бифуркаций. Кеврекидис и др. [425] изучили бифуркации двухмерных мод бризера в частотно-силовой фазовой диаграмме; полученная бифуркационная диаграмма находится в согласии с результатами численного анализа устойчивости.

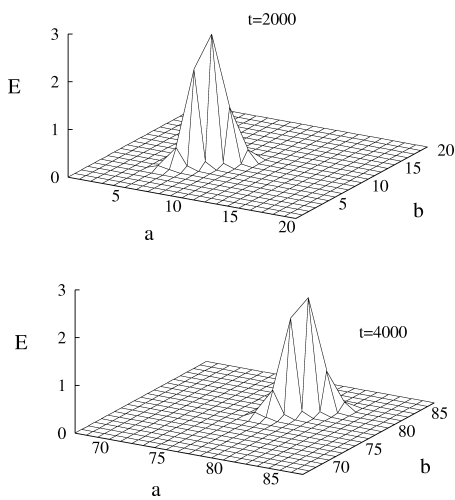


Рис. 4.15. Бризер движущийся вдоль направления плоскости атомов CuO_2 в высокотемпературных сверхпроводниках. Структура имеет Г.Ц.К. слои неподвижных атомов расположенных симметрично выше и ниже, которые создают потенциал подложки для атомов в плоскости (a, b) [429].

Изучение много-размерных бризеров часто вызвано их возможными применениями для описания свойств реальных физических систем. Например, сообщалось что уединенные слои сверхпроводящего купратного материала могут иметь пороговую температуру перехода в сверхпроводящее состояние T_c подобно объемному материалу [427]. Это предполагает, что механизм спаривания в высокотемпературных сверхпроводниках в основном доминирует в слоях кристалла. Дополнительно к этому, другие исследования поддерживают идею, что решеточные структуры и динамические свойства играют критическую роль в механизмах сверхпроводимости [428]. Основываясь на предыдущих исследованиях того, что сверхпроводящие свойства купратов связаны с существованием линейных цепочек атомов, Марин и др. [429] предложили реализацию этих волн в форме подвижных дискретных бризеров, обнаруженных ранее для случая гексагональной решетки [430]. Они провели численное моделирование, которое подтвердило, что нелинейность решетки допускает транспорт сильно локализованных и устойчивых пакетов энергии колебаний (дискретных бризеров) вдоль этих цепей. Эти результаты поддерживают предыдущие исследования, в которых эти частные структурные свойства купратов были связаны с их сверхпроводимостью.

Марин с соавторами [429] промоделировали двухмерный слой соединения YBCO посредством динамики решетки с использованием обобщенной двухмерной модели ФК. Они использовали парные потенциалы между атомами плоскости и промоделировали трехмерное окружение кристалла через взаимодействие со слоями неподвижных атомов расположенных выше и ниже плоскости. Рисунок 4.15 показывает типичное моделирование динамики бризерного пакета (энергия бризера E дана в произвольных единицах). Между этими двумя снимками возбуждение прошло примерно 100 ячеек решетки потеряв только 10% энергии, но оставаясь при этом экспоненциально локализованным возбуждением. Движущиеся бризеры в общем случае не обладают бесконечным временем жизни, в силу неинтегрируемости этих решеточных моделей, но двухмерные движущиеся бризеры, как и их одномерные аналоги, обладают замечательно длинными сроками жизни.

4.6 Физические системы и приложения

Локализованные решения описывающие бризерные моды были найдены для многих нелинейных моделей, включая решетки классических спинов [431]–[434]. Шварцем с соавторами [435] была сделана первая попытка экспериментального наблюдения дискретных бризеров в антиферромагнетиках. Однако, одно из самых впечатляющих наблюдений дискретных бризеров (фактически вращающих мод, названных нами ротобризерами) было сделано в сверхпроводящих структурах. Пространственно локализованные возбуждения в форме дискретных бризеров были возбуждены и изучены экспериментально в конечных цепочках джозефсоновских контактов двумя группами [436, 437]. Эти возбуждения соответствуют пространственно локализованным скачкам напряжения на вольт-амперных кривых при изменении в однородном внешнем поле отклика дискретной решетки точечных контактов. В этом случае, несколько контактов находятся в нормальном состоянии, в то время как другие контакты находятся в сверхпроводящем состоянии. Примечательно, что контакты в сверхпроводящем состоянии генерируют переменное напряжение благодаря связи с резистивными контактами. Это приводит к динамическим эффектам меняющим структуру вольт-амперных характеристик. Бризерные состояния цепочки наблюдались с помощью низкотемпературного лазерного сканирующего микроскопа и сравнивались с численными результатами для решений типа дискретных бризеров соответствующих модельных уравнений. Анализ устойчивости этих решений был использован для интерпретации изменений в структуре вольт-амперных характеристик. Различные состояния на рис. 4.16 показаны для разных ветвей вольт-амперной характеристики. Каждая найденная резистивная конфигурация устойчива вдоль своей частной ветви. Переход между ветвями вызывает разрыв напряжения, когда ветви локализованных состояний теряют свою устойчивость при напряжении примерно 1.4 мВ. Возникновение дискретных бризеров является здесь специфическим свойством систем.

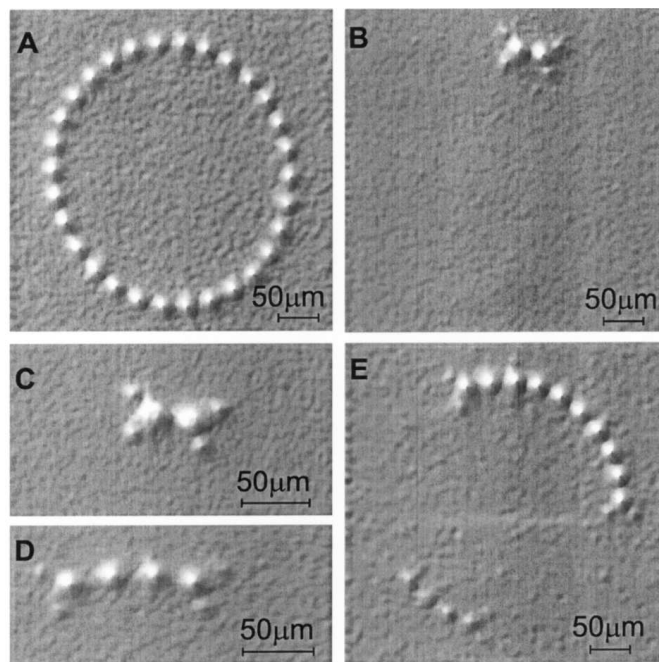


Рис. 4.16. Вихревые состояния измеренные в кольцевой цепочке с помощью низкотемпературного сканирующего лазерного микроскопа: (А) пространственно однородное вихревое состояние, (В – Е) различные локализованные состояния соответствующие дискретным бризерам [436].

Одно из первых экспериментальных наблюдений дискретных бризеров было проведено в волновой оптике, для случая дискретных пространственных солитонов возбужденных в системе волноводов [438] (см. также обзор [439] и книгу [440]). Пространственные оптические солитоны являются автолокализованными оптическими пучками, которые могут распространяться в планарных волноводах или в объемной среде в силу нелинейной самофокусировки вызванной эффектами Керра. Все эксперименты были выполнены для волноводных решеток изготовленных из AlGaAs. Каждый волновод имеет ширину 4 μm и длину – несколько мм. Решетка обычно состояла из 40–60 волноводов. Сила связи между соседними волноводами определяется расстоянием между ними, которое изменялось от 2 μm до 7 μm . В качестве источника света использовался лазер с синхронной накачкой. Лазерный луч посылался в один из волноводов и свет регистрировался после прохождения 6 мм решетки. Для слабых интенсивностей, распространение было линейным и свет дифрагировал на всю ширину

решетки. При повышении интенсивности входного сигнала выше некоторого порогового значения отмечалось конечное распределение света. При мощности свыше 200 Ватт, свет захватывался в близи входного волновода и уширялся не более чем на 5 волноводов, образуя сильно локализованное распределение. Айзенберг и соавторы [438] продемонстрировали хорошее согласие с теоретическими результатами полученными в рамках дискретного нелинейного уравнения Шредингера, в котором дискретная переменная соответствует положениям различных волноводов, а непрерывная переменная – координате вдоль волноводов решетки.

Рассел с соавторами [441] предложили и изучили экспериментальную модель состоящую из ангармонической цепочки магнитных маятников находящихся под действием силы тяжести. Эта нелинейная модель является первым экспериментальным примером который визуально демонстрирует высоко мобильные и сильно локализованные динамически устойчивые колебательные состояния в виде бризерных мод. Этот тип нелинейных возбуждений отличается от хорошо известных сверхзвуковых солитонов Тоды, которые описывают движение деформации решетки постоянного профиля. Более того, модель предложенная Расселом с соавторами [441] интересна сама по себе как превосходный педагогический инструмент для изучения динамики нелинейных решеток.

К сегодняшнему дню было предложено много различных физических приложений дискретных бризеров. Одно из них объясняет медленные релаксационные свойства стекловидных материалов. Другое приложение относится к локализации и транспорту энергии в биологических молекулах посредством бризеров. Эта теория может быть полезна для описания переноса заряда нелинейными электронами (поляронами) и, в более общем случае, для описания транспорта нескольких нелинейных возбуждений, например, давыдовских солитонов.

Основное состояние

До сих пор мы обсуждали только случай, когда среднее расстояние между атомами a_A совпадает с периодом потенциала подложки a_s . В более общем случае мы должны рассмотреть ситуацию $a_A \neq a_s$; когда ФК модель обладает двумя конкурирующими длинами, так что ее основное состояние может быть нетривиальным. В этой главе, мы обсуждаем новые эффекты связанные с существованием таких нетривиальных основных состояний.

5.1 Основные свойства

Цепочка ФК описывается одномерной моделью классической механики, так что можно предположить, что ее основное состояние (ОС), то есть конфигурация атомов с наименьшей потенциальной энергией, является достаточно простым. Это действительно справедливо в случае когда среднее расстояние между атомами a_A совпадает с периодом потенциала подложки a_s . Этот случай соответствует тривиальному ОС, в котором все атомы занимают минимумы потенциала подложки, кроме рассмотренного ранее в параграфе 3.5.2 случая невыпуклого потенциала.

Однако, в более общем случае $a_A \neq a_s$ и модель ФК характеризуется двумя конкурирующими длинами, так что проблема ОС становится менее тривиальной. Действительно, межатомное взаимодействие приводит к равноудаленному распределению атомов, в то время как взаимодействие с подложкой заставляет атомы стремиться в конфигурацию, в которой они регулярно расположены с межатомными расстоянием a_s . В результате соревнования этих взаимодействий может находиться в двух различных состояниях (фазах). Первая фаза является *соизмеримой* (С-фазой, известная также как *периодическая* или *кристаллическая* фаза), когда координаты атомов x_i расположены периодически с периодом a_s (или с периодом кратным a_s). Вторая фаза является *несоизмеримой* (ИС-фазой), когда последовательность координат x_i не описывается простой арифметической прогрессией. Концепция несоизмерности является очень интересной темой как с математической, так и с физической точек зрения. Кроме того, уравнения для стационарных конфигураций координат атомов приводят к так называемому *стандартному отображению*, которое является одной из классических моделей теории хаоса.

В этой главе мы рассматриваем бесконечную ФК цепочку в случае когда длина L и число атомов N стремятся к бесконечности, но линейная концентрация атомов

$$n = \lim_{N, L \rightarrow \infty} N/L, \quad (5.1)$$

остается конечной. Таким образом, среднее расстояние между атомами цепочки будет равно $a_A = L/N = n^{-1}$, а безразмерная концентрация (так называемый *параметр покрытия*) θ задается выражением

$$\theta = \frac{N}{M} = \frac{a_s}{a_A}, \quad (5.2)$$

где мы использовали соотношение $L = Na_A = Ma_s$. Удобно ввести так называемый *параметр соразмерности* (*window number*) w задаваемый уравнением

$$w = a_A \pmod{a_s} \equiv \left\{ \frac{a_A}{a_s} \right\}, \quad (5.3)$$

где $\{x\} = x - \text{int}(x)$, а $\text{int}(x)$ – целая часть числа x , то есть наибольшее целое число, которое меньше или равно x . Кроме того, когда межатомный потенциал $V_{\text{int}}(x)$ имеет абсолютный минимум при некотором a_{min} , удобно вести *параметр несоответствия* P определяемый как

$$P = \frac{a_{\min} - q_0 a_s}{a_s}, \quad (5.4)$$

где $q_0 = \text{int} \left(\frac{a_{\min}}{a_s} + \frac{1}{2} \right)$ – целое число приводящее P в интервал $[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]$.

Важно подчеркнуть, что имеется две различные ситуации, ФК цепочка с “*фиксированной плотностью*” и цепочка со “*свободными концами*”, которые обсудим более подробно.

В случае “фиксированной плотности” (иногда называемым случаем “фиксированной длины” или “фиксированных граничных условий”) мы предполагаем что значения L и N являются фиксированными, так что параметр n (θ или w) является параметром модели. Так как потенциалы V_{sub} и V_{int} не зависят от индекса атома l , то модель является однородной и перенумеровка атомов не меняет физические свойства конфигурации. В силу периодичности V_{sub} , преобразование $\sigma_{i,j}$ определенное как

$$\sigma_{i,j}\{x_l\} = \{x_{l+i} + j a_s\} \quad (5.5)$$

(i и j произвольные целые) приводит к другой конфигурации с той же самой потенциальной энергией. Рассмотрим две конфигурации $\{x_l\}$ и $\{y_l\}$, скажем что одна из них *меньше чем* другая, $\{x_l\} < \{y_l\}$, если $x_l < y_l$ для всех l . Конфигурация $\{x_l\}$ является *ротационно упорядоченной* [442], если для любого симметрического преобразования $\sigma_{i,j}$ преобразованная конфигурация $\{y_l\} = \sigma_{i,j}\{x_l\}$ будет либо меньше чем $\{x_l\}$, либо больше чем, до тех пор пока не совпадет с исходной. Для ротационно упорядоченной конфигурации мы имеем:

$$\begin{aligned} \sigma_{i,j}\{x_l\} &< \{x_l\} \text{ если } iw + j < 0, \\ \sigma_{i,j}\{x_l\} &> \{x_l\} \text{ если } iw + j > 0. \end{aligned} \quad (5.6)$$

Заметим, что конфигурация ОС, так же как конфигурация с минимальной энергией (см. ниже) всегда являются ротационно упорядоченными.

Если значение θ является рациональным,

$$\theta = \frac{s}{q} \quad (5.7)$$

с взаимно простыми s и q , так что

$$w = q \pmod{s} \equiv \left\{ \frac{q}{s} \right\} = \frac{r}{s}, \quad (5.8)$$

где $r = q - s \text{int}(q/s)$, то конфигурация ОС будет S -фазой с периодом

$$a = q a_s = s a_A, \quad (5.9)$$

и элементарная ячейка будет состоять из s атомов. С другой стороны, для иррационального значения θ ОС будет иметь несоизмеримую фазу. Структура несоизмеримой фазы в модели ФК полностью определяется значением параметра g . А именно, с превышением g некоторого критического значения $g_{\text{Aubry}}(\theta)$ внезапно происходит “переход разрушающий аналитичность” и одновременно появляются “сдвиговые моды” (см. далее параграф 5.2.2). Обри и Ле Дерон [443] доказали что конфигурация ОС однозначно определяется значением параметра θ , если потенциал взаимодействия является строго выпуклым, то есть если существует постоянная C такая, что $V_{\text{int}}''(x) \geq C > 0$ для всех x , $0 < x < \infty$. Для невыпуклых межатомных потенциалов (таких как потенциал Морса или синусоидальный потенциал, см. параграф 5.4.3) ситуация значительно сложнее; например, в случае $a_{\min} < a_A$ цепочка может разрываться на две независимые полубесконечные части со свободными концами.

Другая ситуация возникает когда цепочка имеет один или два свободных конца, так что ее длина L уже не является фиксированной (случай “свободных концов” или “граничные условия открытых концов”). Конечно, цепочка “со свободными концами” может существовать только если потенциал $V_{\text{int}}(x)$ имеет притягивающую ветвь, то есть минимум на некотором расстоянии $a_{\min}$. Однако, если мы предположим, что некоторая внешняя сила (“давление” P) приложена к конечным атомам, ситуация “свободных концов” будет иметь место и для межатомного отталкивания. Аналогичная ситуация так же происходит когда ФК система находится “в контакте” с “фазой пара” имеющей ненулевой химический потенциал μ , так что число атомов N не является фиксированным. В этих случаях один из параметров $a_{\min}(P)$, P , или μ является параметром модели определяющим значение θ , и поэтому он определяет конфигурацию ОС. А именно, для малых значений несоответствия P , атомы конфигурации ОС равномерно размещены в минимумах ям потенциала подложки (тривиальное ОС). С увеличением $|P|$, выше критического значения P_{FM} ОС непрерывно переходит в состояние характеризующиеся конечной плотностью кинков (“кинк” будет строго определен далее в параграфе 5.2.1). Когда $|P|$ увеличивается и превышает P_{FM} , средний период a_A принимает бесконечное число значений, так что каждое значение соответствует высоко-упорядоченной соразмерной фазе. Кривая $a_A(P)$ (или подобные, см. зависимость $w(P)$ на рис. 5.1) известна благодаря Мандельбрату [444] под именем *лестница дьявола* (в математической литературе она известна как “канторовская функция”). Для больших значений параметра g , $g \gg 1$, общая ширина шагов очень мала и между значением a_A расположены несоизмеримые фазы с

иррациональными значениями w , так что дьявольская лестница является “неполной”. Однако, когда величина g превышает критическое значение g_{Aubry} ($g_{\text{Aubry}} \approx 1$), переход разрушающий аналитичность проявляется через исчезновение несоизмеримых основных состояний; несоизмеримые фазы больше уже не являются основными состояниями, так как высоко-упорядоченная С-фаза становится всегда более предпочтительной конфигурацией с меньшей энергией. В этом случае кривая $a_A(P)$ описывается “полной” дьявольской лестницей.

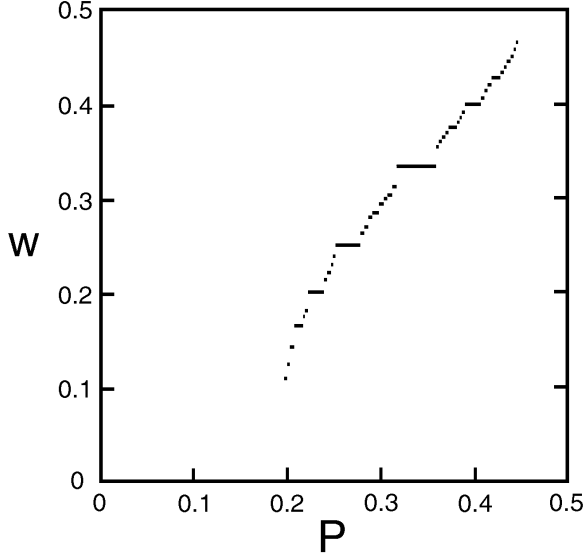


Рис. 5.1. Зависимость параметра соразмерности w от параметра несоответствия P для ФК цепи со свободными концами ($g = 1$) [445].

Исследование упомянутых выше вопросов было начато в работах of Инга [446], Соколова [447], Обри [448]–[454], Булаевского и Хомского [455], Теодору и Райса [456], Покровского и Талапова [457], Сакко и Соколова [458], Бака [459] и продолжают до сих пор (см. также обзоры [277, 460, 461]).

Недавно, методом сканирующей туннелирующей микроскопии Хипало с соавторами [462] наблюдал упорядоченные фазы в Pb/Si(111) являющемся одним из лучших примеров фазовой диаграммы типа дьявольской лестницы. В этом случае в пределах узкого диапазона покрытия ($1.2 < \theta < 1.3$ монослоев) фазы построены согласно правилам предсказанным в теоретических моделях.

Каждая конфигурация $\{x_l\}$ характеризуется своей потенциальной энергией

$$E_N(\{x_l\}) = \sum_{l=1}^N V_{\text{sub}}(x_l) + \sum_{l=2}^N V_{\text{int}}(x_l - x_{l-1}), \quad (5.10)$$

где учтены только взаимодействия ближайших соседних атомов. Для бесконечной цепочки атомов мы можем определить энергию приходящуюся на один атом $\varepsilon(\{x_l\})$,

$$\varepsilon(\{x_l\}) = \frac{1}{N} \lim_{N \rightarrow \infty} E_N(\{x_l\}). \quad (5.11)$$

Стационарная конфигурация определяется таким способом, чтобы сила действующая на каждый атом была равна нулю:

$$\frac{\partial E_N(\{x_l\})}{\partial x_l} = 0 \quad \text{для всех } l. \quad (5.12)$$

Стационарная конфигурация является неустойчивой если малое смещение конечного числа атомов приводит к уменьшению потенциальной энергии системы. Конечно, большинство неустойчивых конфигураций являются седловыми, для которых энергия уменьшается только в одном направлении N -мерного конфигурационного пространства и увеличиваются для остальных. Устойчивые стационарные конфигурации соответствуют локальным минимумам функции $\varepsilon(\{x_l\})$, и большинство из них описывает метастабильные состояния системы. Для того чтобы найти основное состояние ФК цепи, мы должны искать устойчивую конфигурацию, которая удовлетворяет следующим трем условиям:

- (a) Она должна удовлетворять подходящим граничным условиям, которые различны для случаев “фиксированной плотности” и “свободных концов”;
- (b) Она должна соответствовать абсолютному минимуму потенциальной энергии;

- (с) Она должна быть “однородной”, или “бездефектной”, или “рекуррентной” согласно Обри [460]. Это условие важно для бесконечной цепи атомов, так как *конечное* число локальных дефектов (кинков) вставленных в конфигурацию ОС не изменит энергию $\varepsilon(\{x_l\})$.

Явное строгое вычисление конфигурации ОС может быть проведено только для частных, сильно упрощенных моделей, таких как модель с периодическим потенциалом подложки $V_{\text{sub}}(x)$ построенным из соединенных кусков парабол. В общем случае система уравнений (5.12) неинтегрируема, поэтому требуется применение численных методов. Один из методов, использованный Пейраром и Обри [463] и Брауном [176], так называемый “градиентный метод”, стартует с подходящей начальной конфигурации и затем решает набор уравнений

$$\frac{dx_l}{d\tau} = -\frac{\partial E_N(\{x_l\})}{\partial x_l}. \quad (5.13)$$

Решение уравнения (5.13) дает траекторию системы в сильно демпфированном пределе $\eta \rightarrow \infty$ (так называемую “адиабатическую” траекторию – см. параграф 5.2.1), которая всегда стремится к устойчивой конфигурации. Для того чтобы избежать метастабильных конфигураций, к правой части уравнения (5.13) можно добавить гауссовскую случайную силу. В процессе моделирования амплитуду шума нужно уменьшать до нуля с малой скоростью γ . Однако, в случае $g \ll 1$ необходимое время моделирования t_s резко возрастает, $t_s \propto \ln \ln 1/\gamma$, и нужно использовать специальную процедуру введения “вычислительные ферменты” [464]. Заметим также, что τ в уравнении (5.13) не является временем, но меняется вдоль траектории. Главной трудностью этого метода является угадывание “хорошей” начальной конфигурации ведущей к ОС. Другая проблема связана с необходимостью отличить конечную конфигурацию ОС от многочисленных метастабильных конфигураций.

Другим методом является прямое решение уравнений (5.12) методом Ньютона, быстрая сходимость которого резко уменьшает время вычисления. Этот метод, однако, требует очень хорошего выбора правильного начального условия [465]–[467].

Самый эффективный численный метод, гарантирующий получение ОС (или по крайней мере в случае вырождения одного из ОС) был предложен Гриффитцем и Чоу [276]. Этот метод называется “методом минимизации собственных значений” или “методом эффективного потенциала”; он был кратко рассмотрен в главе 3.5.2, см. также работы [277, 445]. Заметим, что численные методы всегда имеют дело с соразмерной фазой, так как при компьютерном моделировании число N всегда конечно. Однако, соответствующий выбор N и M , такой какой дает последовательность Фибоначи, приводит к значениям параметра w , которые практически неотличимы от иррациональных чисел. Заметим также, что в случае “свободных концов” концы цепи должны быть свободными, в то время как для случая “фиксированной плотности” нужно использовать периодические граничные условия,

$$x_{N+1} = x_1 + N a_A. \quad (5.14)$$

Помимо численных вычислений, важные результаты о структуре стационарной ФК конфигурации можно получить заменив уравнение (5.12) “симплексным отображением”. Например, для стандартной модели ФК с синусоидальным потенциалом подложки,

$$V_{\text{sub}}(x) = 1 - \cos x, \quad (5.15)$$

и гармоническим взаимодействием только ближайших соседей,

$$V_{\text{int}}(x) = \frac{1}{2}g(x - a_{\min})^2, \quad (5.16)$$

стационарные конфигурации должны удовлетворять системе разностных уравнений

$$g(x_{l+1} + x_{l-1} - 2x_l) = \sin x_l. \quad (5.17)$$

Обри [448] был первым, кто показал что уравнение (5.17) может быть переписано как двумерное сохраняющее площадь нелинейное искривляющее отображение

$$\begin{aligned} x_{l+1} &= x_l + p_{l+1}, \\ p_{l+1} &= p_l + K \sin x_l, \end{aligned} \quad (5.18)$$

где $K \equiv g^{-1}$. Используя подстановку $x_l = \tilde{x}_l + q_0 l a_s$, $p_l = \tilde{p}_l + q_0 a_s$ с подходящим целым числом q_0 , отображение (5.18) можно переписать как

$$Y_{l+1} = T Y_l, \quad (5.19)$$

где точка $Y_l = (\tilde{x}_l, \tilde{p}_l)$ определена на торе $(0, a_s) \times (0, a_s)$. Так, отображение (5.19) позволяет представить любую стационарную конфигурацию модели ФК как траекторию “искусственной” нелинейной динамической системы с дискретным “временем” l и “эволюционным” оператором T .

Сохраняющие площадь искривляющие отображения были экстенсивно изучены (см. например ссылку [468]) как примеры динамических Гамильтоновых систем, которые демонстрируют полный диапазон возможных динамик от регулярной (интегрируемой) до хаотического движения. Эти отображения являются общими для широкой области различных физических объектов, от ускорителя до химической физики и физики жидкостей. Уравнение (5.18), известное как стандартное отображение Тэйлора-Чирикова, является наиболее хорошо изученным примером сохраняющего площадь отображения. Оно было впервые рассмотрено Чириковым [469], а затем изучено в большом числе работ [470]–[473], так как оно описывает временную динамику маятника под действием синусоидальной силы, который является одной из классической моделей демонстрирующих переход от регулярного к хаотическому движению.

Стартуя из любой точки Y_0 на торе, последовательное применение отображения T или T^{-1} генерирует орбиту $\{Y_l\}$, которая может быть либо регулярной (периодической), если $T^s Y_l = Y_l$, или квазипериодической, если все точки Y_l лежат на непрерывной кривой на торе, или хаотической (см. рис. 5.2). Не входя в детали, мы приведем только основные аспекты поведения таких систем (полная теория можно найти в монографиях [473, 474]).

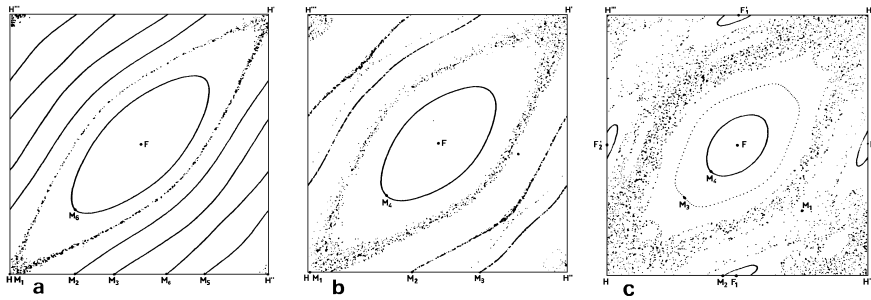


Рис. 5.2. Отображение преобразования $(x_{l+2}, x_{l+1}) = T'(x_{l+1}, x_l)$ показывающее траектории начальных точек M_i изображенных на рисунках для стандартной ФК модели при (a) $g = 13.333$, (b) $g = 10$ и (c) $g = 8$ [460].

При $K = 0$ (или $g = \infty$) отображение (5.19) является интегрируемым и все орбиты будут регулярными. Они могут быть классифицированы при помощи параметра соразмерности w : все точки Y_l данной орбиты $\{Y_l\}$ лежат на принадлежащей тору окружности $\tilde{p} = wa_s = \text{const}$ и делают поворот на угол $2\pi w$ на одной итерации отображения. Соответствующая ФК конфигурация имеет постоянное расстояние между атомами. Все орбиты (включая счетное множество периодических орбит с рациональными значениями w) являются скользящими (не закрепленными), то есть они могут вращаться как одно целое на любой угол. Это значит, что смещение ФК конфигурации на любое расстояние Δx приводит к эквивалентной конфигурации имеющую ту же самую энергию. Иррациональные параметры окон производят несчетное бесконечное множество квазипериодических орбит, которые соответствуют несоизмеримым фазам ФК модели. Так образом, при $K = 0$ скользящие орбиты покрывают целый тор и образуют множество с мерой $\nu_s = 1$.

Регулярные орбиты продолжают существовать при любом $K \neq 0$. Для любого рационального $w = r/s$ здесь существуют периодическая орбита с периодом s , $T^s Y_l = Y_l$. Однако, при $K \neq 0$ периодическая орбита всегда находится в закрепленном состоянии, то есть состоит только из конечного числа фиксированных точек, и соответствующая ФК конфигурация закрепляется потенциалом подложки. Заметим, что для некоторых специальных потенциалов, таких как кусочно-параболический $V_{\text{sub}}(x)$ с непрерывной первой производной, это отображение является интегрируемым и, следовательно, незакрепленные (скользящие) конфигурации с рациональным w существуют при $K \neq 0$ [445]. Для любого иррационального значения w также существуют регулярные орбиты. Хорошо известная теорема Колмогорова-Арнольда-Мозера гарантирует, что эти орбиты (“инвариантные” орбиты или “КАМ-торы”) сохраняются при малых возмущениях и имеют на торе конечную меру ν_s , $0 < \nu_s < 1$, так что скользящие конфигурации ФК модели продолжают существовать по крайней мере для малых $K \neq 0$. Окружности с иррациональным w , которые лежат между регулярными (“инвариантными”) орбитами разрушаются хаосом, так что соответствующие орбиты будут “хаотическими”, а ФК конфигурации – закрепленными. Согласно теории стохастичности, “область” ν_c занятая хаотическими орбитами должна возрастать с увеличением K . Разрушение регулярных орбит начинается с “резонансных” окружностей, которые являются “близкими” к “простым” периодическим орбитам (то есть к орбитам с $w = 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{3}$, и т.д.), и заканчивается на окружностях с “наиболее иррациональным” числом, золотом сечением $w_{\text{gm}} = (\sqrt{5} - 1)/2$ (или $w'_{\text{gm}} = 1 - w_{\text{gm}}$) при $K = K_c$. Вдали от хаотического порога K_c более нет незакрепленных орбит, большинство тора занято хаотическими орбитами, и $\nu_c = 1$. Несчетное множество регулярных орбит с иррациональными значениями w продолжают существовать, но теперь они образуют канторово множество, которое на торе имеет нулевую меру $\nu_s = 0$. Поэтому при $K \geq K_c$ все стационарные конфигурации ФК модели будут закрепленными. Величина порога хаотичности $K_c \equiv g_{\text{Aubry}}^{-1}(w_{\text{gm}})$ может быть найдена с помощью критерия Грина [471, 472, 475], и она оценивается как $K_c \approx 0.971635406$ (см., например, ссылки [460, 473, 476]). (Заметим, что иррациональное число золотой середины $w_{\text{gm}} = (\sqrt{5} - 1)/2$ может быть приближено рациональными дробями, которые образуют

последовательность Фибоначи $w_n = s_{n-1}/s_n$ с $s_n = s_{n-1} + s_{n-2}$ и $s_0 = 1, s_1 = 2$, так что $w_5 = 8/13, w_6 = 13/21, w_7 = 21/34, w_8 = 34/55, w_9 = 55/89, w_{10} = 89/144$, и т.д., и $|w_{10} - w_{\text{gm}}| \approx 2 \times 10^{-5}, |w_{14} - w_{\text{gm}}| \approx 5 \times 10^{-7}$, и т.д.)

Каждая орбита отображения (5.19) в модели ФК соответствует стационарной конфигурации. Заметим, что хотя отображение (5.19) не зависит от величины параметра модели $a_{\min}$, но соответствующие ФК конфигурации характеризуются их потенциальной энергией $\varepsilon(\{x_l\})$, которая зависит от $a_{\min}$. Большинство орбит соответствует неустойчивым конфигурациям ФК модели. (Заметим, что физическая устойчивость ФК конфигурации не должна быть перепутана с устойчивостью соответствующей орбиты. Например, тривиальная ФК конфигурация соответствует “динамически неустойчивой” неподвижной точки стандартного отображения). Малая доля орбит соответствует метастабильным конфигурациям и только одна описывает ОС. Напомним, что конфигурация ОС:

- (а) должна удовлетворять граничным условиям (для случая “свободных концов” мы должны рассмотреть все орбиты, в то время как для случая “фиксированной плотности” мы должны выделить орбиты с фиксированным значением параметра соразмерности w);
- (б) должна соответствовать наименьшей потенциальной энергии;
- (с) должна быть “рекуррентной” (согласно Обри [460], рекуррентная орбита должна возвращаться к любой окрестности любой своей точки. На интуитивном уровне основная идея здесь состоит в том, что любая часть ФК конфигурации появится позже снова в той же самой конфигурации в пределе произвольно близкого приближения).

Обри и Ле Дерон [443] доказали, что конфигурация ОС всегда связана с регулярной орбитой. Для рационального w орбита ОС периодична, при иррациональном w она является регулярной либо на непрерывной циклической траектории (гладкий “КАМ тор”) или на разрывном канторовом множестве. Переход к разрушению аналитичности Обри, который для случая “фиксированной плотности” происходит при $g = g_{\text{Aubry}}(w)$, соответствует стохастическому разрушению непрерывного цикла с данным w . Более того, отметим, что орбита ОС остается регулярной (не хаотической) несмотря на то, что она вложена в хаотическую область отображения, то есть она только принадлежит канторовому множеству нулевой меры орбит, которые не являются хаотическими. Переход от “неполной” к “полной” дьявольской лестницы для модели со “свободными концами” происходит при $K_c = g_c^{-1}$, где $g_c = \min_w g_{\text{Aubry}}(w) = g_{\text{Aubry}}(w_{\text{gm}})$, когда разрушены все “инвариантные” циклы.

Метастабильные ФК конфигурации описывают возбужденные состояния модели. В частности, фракция “хаотических” орбит соответствует метастабильным конфигурациям с хаотически закрепленными кинками. Таким образом, ФК модель может быть использована при исследовании аморфных тел (см. параграф 6.3). Другим физически важным решением модели является гомоклиническая орбита, которая стремится к разным периодическим орбитам при $l \rightarrow \pm\infty$. Эта орбита соответствует возбужденному кинку ФК модели. Гомоклинические точки являются точками пересечения устойчивого многообразия, континуума точек которые стремятся к периодической орбите при $l \rightarrow +\infty$, и неустойчивого многообразия, определенного аналогичным условием при $l \rightarrow -\infty$. Если эти многообразия пересекаются под ненулевым углом, кинки будут закреплены и стандартное отображение может быть использовано для вычисления энергии пининга [149, 156]. В противном случае, когда многообразия сливаются в одну непрерывную кривую, ПН барьер становится нулевым.

5.2 Цепочка с фиксированной плотностью

5.2.1 Соразмерные конфигурации

Конфигурация $\{x_l\}$ является соразмерной если существует два неприводимых положительных целых числа s и q таких, что

$$x_{l+s} = x_l + qa_s \quad (5.20)$$

для всех l . Число атомов s в одной ячейке С-структуры называют “порядком” С-фазы [446]. Для $s = 1$ С-фаза тривиальна. Для того чтобы определить координаты в нетривиальной С-фазе (то есть для $s \geq 2$) нужно решить систему $s - 1$ трансцендентных уравнений [446, 456].

Фононный спектр системы описывает малые колебания около устойчивых положений атомов. Спектр С-фаз оптический, то есть всегда начинается с конечной частоты $\omega_{\min} > 0$ [446, 456]. Для тривиального ОС с $s = 1$ он имеет форму

$$\omega^2(\kappa) = \omega_0^2 + 2c^2(1 - \cos \kappa), \quad |\kappa| \leq \pi, \quad (5.21)$$

с $\omega_0 = 1$ и $c = \sqrt{g}$ для стандартной модели ФК. Для С-фаз более высокого порядка при $s \geq 2$ частотный спектр может быть определен точно таким же способом как фононный спектр трансляционно-упорядоченной кристаллической решетки. Нормальные моды образуют s ветвей (возможно разделенных запрещенными щелями), а минимальная фононная частота $\omega_{\min}$ убывает с ростом порядка структуры s .

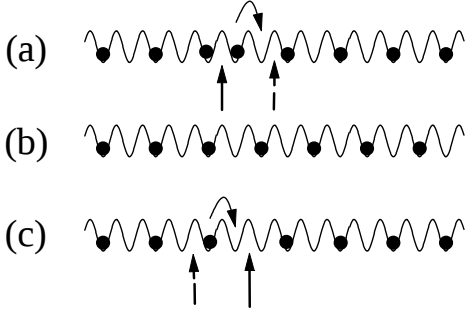


Рис. 5.3. Кинк (а) и антикинк (с) на фоне соразмерной структуры (b) с $\theta_0 = 1/2$ ($s = 1$, $q = 2$, $w = 0$). Сплошная (пунктирная) стрелка показывает положение кинка и антикинка до (после) смещения вправо одного атома цепочки.

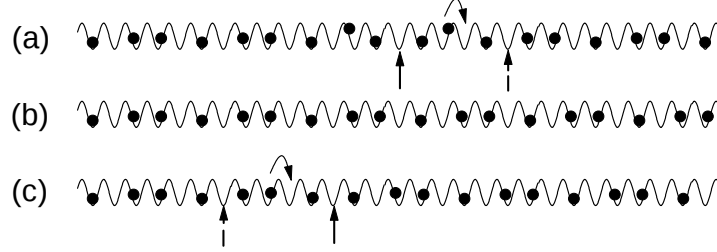


Рис. 5.4. То же, что и на рис. 5.3, но для $\theta_0 = 3/5$ ($s = 3$, $q = 5$, $w = 2/3$).

Кроме фононов модель ФК обладает существенно нелинейные возбуждения называемые кинками. Их существование следует из того факта что периодический потенциал подложки $V_{\text{sub}}(x)$ для любой ФК конфигурации является бесконечно вырожденным. А именно, эквивалентные конфигурации можно получить из исходной простым сдвигом и/или перенумерацией, то есть преобразованием $x_l \rightarrow x_{l+i} + ja_s$ с произвольными целыми i и j . Конфигурации в виде кинков описывают состояния которые “связывают” два соразмерных основных состояния бесконечной ФК цепочки. Из-за граничных условий такие возбуждения топологически устойчивы. Нужно подчеркнуть, что кинки существуют только в соразмерных структурах, для несоизмеримых фаз возбуждения типа кинка не существуют. Обри и Ле Дерон [443] доказали строгую теорему которая утверждает, что всегда существует пара соразмерных основных состояний $\{x_l^-\}$ и $\{x_l^+\}$ таких, что нет основного состояния $\{x_l\}$, для которого при всех l выполнено неравенство

$$x_l^- < x_l < x_l^+. \quad (5.22)$$

Однако, существует *конфигурация с минимальной энергией* (м.е.-конфигурация) (то есть, стационарная конфигурация удовлетворяющая граничным условиям и соответствующая минимуму потенциальной энергии, но не являющаяся периодической) $\{y_l\}$ такая, что для всех l

$$x_l^- < y_l < x_l^+ \quad (5.23)$$

и

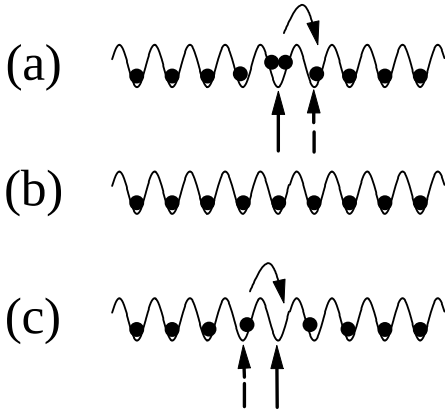
$$\lim_{l \rightarrow -\infty} (x_l^+ - y_l) = 0, \quad \lim_{l \rightarrow +\infty} (y_l - x_l^-) = 0. \quad (5.24)$$

Аналогично, так же существует м.е.-конфигурация, которая удовлетворяет условиям

$$\lim_{l \rightarrow -\infty} (y_l - x_l^-) = 0, \quad \lim_{l \rightarrow +\infty} (x_l^+ - y_l) = 0. \quad (5.25)$$

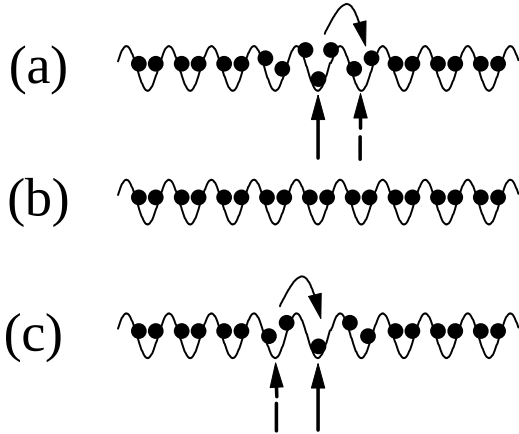
Уравнение (5.24) [или (5.25)] определяют конфигурацию кинка (или антикинка), которая является некоторым возбужденным состоянием С-фазы. Отметим, что Обри использовал для кинка (антикинка) более строгое, но более длинное название “запаздывающая (или опережающая) элементарная несоизмеримость” (“delayed (or advanced) elementary decommensuration”).

Таким образом, в присутствии в цепи кинка или антикинка, последовательность x_l , каждый раз на несколько ячеек, теряет или получает несколько шагов a_s из ближайшей С-фазы. Иначе, кинк (антикинк) с топологическим зарядом $\sigma = +1$ ($\sigma = -1$) может быть определен как минимально возможное сжатие (растяжение) С структуры, когда на бесконечности, то есть для $l \rightarrow \pm\infty$, расположение атомов относительно минимума потенциального потенциала совпадает с их расположением в ОС. На рис. 5.3–5.6 показаны примеры структур кинков для различных С-фаз.

Рис. 5.5. Тоже, что на рис. 5.3, но для $\theta_0 = 1$ ($s = 1$, $q = 1$, $w = 0$).

Конфигурация $\{y'_l\} \equiv \{y_{l-s} + qa_s\}$ удовлетворяет тем же самым условиям (5.23)–(5.25). Она соответствует кинку сдвинутому на $a = qa_s$, то есть на одну элементарную ячейку соразмерного ОС. Барьер Пейрлса-Набарро (ПН) ε_{PN} [142, 143] определяется как наименьший энергетический барьер который должен быть преодолен при непрерывном смещении конфигураций $\{y_l\} \rightarrow \{y'_l\}$ (для точное определения ПН барьера дано в [477]). Таким образом, кинк является локализованной квазичастицей, которая может двигаться вдоль цепи и может быть охарактеризована своей координатой, массой, энергией и т.п.

При концентрации $\theta_0 = s$ структура кинка тривиальна (избыточный атом соответствует кинку, а вакансия – антикинку, см. рис. 5.5 и 5.6), но при произвольной концентрации $\theta_0 = s/q$ с $q \neq 1$ она намного сложнее. Общий метод построения кинкового возбуждения со сложной структурой рассмотрен в параграфе 11.3.3). Пример такого кинка (антикинка) на фоне соразмерной структуры с концентрацией $\theta_0 = \frac{1}{2}$ [рис. 5.3(b)] дан на рис. 5.3(a) [рис. 5.3(c)]. Стрелки на рис. 5.3(a) [рис. 5.3(c)] показывают атом, смещение которого вправо в ближайший соседний минимум потенциала подложки приводит к смещению кинка направо (антикинка налево) на один период структуры a . Аналогично, смещение атома направо в соразмерной структуре [рис. 5.3(b)] приводит к созданию в системе кинк-антикинковой пары. Рисунки 5.4 – 5.6 показывают структуру кинка при $\theta_0 = 3/5$, 1 и 2. Заметим, что по сравнению с начальной соразмерной структурой, кинк содержит σ/q лишних атомов.

Рис. 5.6. Тоже, что на рис. 5.3, но для $\theta_0 = 2$ at $s = 2$, $q = 1$, and $w = 1/2$.

Форму кинка удобно описать смещениями

$$u_l = y_l - x_l^-. \quad (5.26)$$

Для С-структуры с сложной элементарной ячейкой удобно разделить индекс l на два подиндекса, $l = (i, j)$, где $j = 0, \pm 1, \dots$ соответствует номеру элементарной ячейки, а $i = 1, \dots, s$ нумерует атомы в ячейке. Так, для изолированного кинка смещения u_l удовлетворяют правилу суммирования

$$\sum_{i=1}^s (u_{i,j=+\infty} - u_{i,j=-\infty}) = -\sigma a_s. \quad (5.27)$$

Следуя Бергману с соавторами [146], координата изолированного кинка может быть определена как центр масс системы

$$X = q \sum_l u_l + C, \quad (5.28)$$

где дополнительная константа C выбирается так, что максимум отклонения от исходной конфигурации происходил на атоме $l_0 = X/a$ (см. стрелки на рис. 5.3–5.6). Энергия покоя кинка, измеряемая относительно соответствующего ОС с тем же самым числом атомов, определяется как

$$\varepsilon_k = \lim_{N \rightarrow \infty} [E_N(\{y_l\}) - E_N(\{x_l^-\})], \quad (5.29)$$

или, более строго для сложной соответствующей структуры [478], как

$$\varepsilon_k = \lim_{i,p \rightarrow \infty} \frac{1}{s} \sum_{j=p+1}^s \sum_{l=-i+1}^j [V(y_l, y_{l-1}) - V(x_l^-, x_{l-1}^-)], \quad (5.30)$$

где

$$V(x, x') = V_{\text{int}}(x - x') + V_{\text{sub}}(x). \quad (5.31)$$

Для гармонического потенциала $V_{\text{int}}(x) = \frac{1}{2}g(x - a_{\text{min}})^2$ энергия кинка может быть представлена как

$$\varepsilon_k = -ga_s P(x_{\text{c.m.}}^+ - x_{\text{c.m.}}^-) + E_k, \quad (5.32)$$

где E_k не зависит параметра несоответствия P , и центр масс координат элементарной ячейки определяется уравнением

$$x_{\text{c.m.}}^\pm = \frac{1}{s} \sum_{l=-(s-l)/2}^{(s-l)/2} x_l^\pm \quad (\text{нечетные } s), \quad (5.33)$$

или

$$x_{\text{c.m.}}^\pm = \frac{1}{s} \sum_{l=-s/2+1}^{s/2} x_l^\pm \quad (\text{четные } s). \quad (5.34)$$

Когда ФК цепочка содержит более одного кинка, то взаимное влияние кинков друг на друга изменяет их форму и приводит дополнительному вкладу в энергию системы, который можно интерпретировать как энергию взаимодействия кинков. Конечно, в общем случае это взаимодействие не является парным. Кроме того, так как кинк содержит избыточное число атомов (равное σ/q), взаимодействие этих атомов приводит к дополнительному вкладу в энергию взаимодействия кинков, если межатомный потенциал $V_{\text{int}}(x)$ является дальнедействующим. Обычно кинки с теми же самыми топологическими зарядами отталкиваются, в то время как кинк и антикинк притягиваются друг к другу (см. главу 3).

Когда кинк движется вдоль цепи, мы можем формально записать скорость частиц как $dx_l/dt = (\delta x_l / \delta X)(dX/dt)$, тогда кинетическая энергия будет иметь форму

$$K = \frac{m}{2} \left(\frac{dX}{dt} \right)^2, \quad (5.35)$$

где m – эффективная масса кинка определенная как

$$m = m_a \sum_l \left(\frac{\delta u_l}{\delta X} \right)^2. \quad (5.36)$$

Повторим, что движение кинка происходит под действием ПН потенциала $V_{PN}(X)$, который имеет амплитуду ε_{PN} и период a . Обе эти характеристики, эффективная масса и форма ПН потенциала, зависят от траектории движения кинка. В дальнейшем мы будем предполагать, что кинк движется вдоль “адиабатической” траектории, определенной как кривая в N -мерном конфигурационном пространстве системы связывающая две т.е. конфигурации $\{y_l\}$ и $\{y'_l\}$. Эта кривая проходит через ближайшую седловую конфигурацию с наименьшей потенциальной энергией и определяется дифференциальными уравнениями (5.13). Физически это означает, что кинк движется адиабатически медленно. Нужно отметить, что все параметры кинка зависят от структуры соответствующего соразмерного ОС, то есть от параметра модели θ_0 . Так как ФК модель является неинтегрируемой, то эти параметры кинка могут быть найдены только численно. При компьютерном моделировании вместо движения одного изолированного кинка в бесконечной цепи удобнее рассмотреть одновременное движение кинков в бесконечной периодической структуре кинков (в кноидальной волне). Пусть Ma_s – период этой структуры,

тогда для моделирования достаточно поместить цепочку из N атомов на периодический потенциал подложки с M минимумами и наложить периодические граничные условия. Для того чтобы иметь единственный кинк на длине Ma_s на фоне соразмерной структуры $\theta_0 = s/q$, значения N и M должны удовлетворять уравнению для целых чисел [165]

$$qN = sM + \sigma. \quad (5.37)$$

Получающаяся соразмерная структура кинков характеризуется средней концентрацией

$$\theta = N/M = \theta_0 + \sigma/Mq, \quad (5.38)$$

и расстоянием между кинками равным Ma_s . Подчеркнем, что этот метод дает характеристики кинка для соответствующего ОС с концентрацией θ_0 , а не с θ . Однако, взаимное взаимодействие кинков в их периодической структуре может нарушать результаты, поэтому число M должно быть достаточно большим. Здесь следует также упомянуть численный метод of Гриффитца и соавторов [277], который позволяет получить не только ОС, но также и конфигурации кинка.

Помимо компьютерного моделирования, приближенные результаты могут быть получены в двух предельных случаях, которые будут рассмотрены ниже, в случаях слабого и сильного межатомного взаимодействия.

Приближение слабой связи

Вначале мы рассмотрим случай слабого взаимодействия между атомами, $V_{\text{int}}(a_A) \ll \varepsilon_s$, когда все атомы находятся вблизи соответствующих минимумов потенциала подложки. Например, при концентрации $\theta_0 < 1$, когда в одной потенциальной яме находится не более одного атома, мы можем пренебречь малым смещением атомов от их положений соответствующих минимумам $V_{\text{sub}}(x)$. Тогда для движения кинков или антикинков на фоне состояния с концентрацией $\theta_0 = s/q$ лежащей в интервале $(1+p)^{-1} < \theta_0 < p^{-1}$ (включая кинк на фоне концентрации $\theta_0 = (1+p)^{-1}$ и антикинк на фоне с $\theta_0 = p^{-1}$), где $p \equiv \text{int}(\theta_0^{-1})$ является целым, из простого геометрического рассмотрения [см. рис. 5.3, 5.4, и 5.5(с)] мы получим для амплитуды ε_{PN} потенциала ПН следующее выражение [165],

$$\varepsilon_{PN} \approx \varepsilon_s + 2V_{\text{int}}\left(pa_s + \frac{1}{2}a_s\right) - V_{\text{int}}(pa_s) - V_{\text{int}}(pa_s + a_s). \quad (5.39)$$

Важно отметить, что масса кинка m , энергия кинка и антикинка ε_k и $\varepsilon_{\bar{k}}$, и разница амплитуд ПН потенциала для кинка и антикинка $\delta\varepsilon_{PN}$, зависят только от взаимодействия элементарных ячеек на расстоянии $a = qa_s$, а не от взаимодействия соседних атомов в пределах ячейки на расстоянии $a_A = a/s$:

$$m \approx 1/q^2, \quad (5.40)$$

$$\varepsilon_k \approx V_{\text{int}}(a - a_s) - V_{\text{int}}(a), \quad (5.41)$$

$$\varepsilon_{\bar{k}} \approx V_{\text{int}}(a + a_s) - V_{\text{int}}(a), \quad (5.42)$$

$$\begin{aligned} \delta\varepsilon_{PN} \approx & \left[2V_{\text{int}}\left(a + \frac{1}{2}a_s\right) - V_{\text{int}}(a) - V_{\text{int}}(a + a_s) \right] \\ & - \left[2V_{\text{int}}\left(a - \frac{1}{2}a_s\right) - V_{\text{int}}(a - a_s) - V_{\text{int}}(a) \right]. \end{aligned} \quad (5.43)$$

Из уравнений (5.39) – (5.43) следует, что

$$\varepsilon_k^\sigma = -\sigma a_s V'_{\text{int}}(a) + E_k, \quad E_k \approx \pi^2 g_a \varepsilon_s, \quad (5.44)$$

$$\varepsilon_{PN} \approx \varepsilon_s \left(1 - \frac{1}{2} \pi^2 g_p \right), \quad (5.45)$$

и

$$\delta\varepsilon_{PN} \simeq \frac{1}{2} \pi^2 \alpha g_a \varepsilon_s, \quad (5.46)$$

где

$$g_p = \frac{a_s^2}{2\pi^2 \varepsilon_s} V''_{\text{int}}\left(pa_s + \frac{1}{2}a_s\right), \quad g_a = \frac{a_s^2}{2\pi^2 \varepsilon_s} V''_{\text{int}}(a), \quad (5.47)$$

а α – безразмерный параметр нелинейности потенциала $V_{\text{int}}(x)$,

$$\alpha = -\frac{a_s V_{\text{int}}'''(a)}{V_{\text{int}}''(a)}. \quad (5.48)$$

Случай концентрации $\theta_0 > 1$ является более сложным. Например, для кинка на фоне структуры с $\theta_0 = 1$, два атома с координатами x_1 и x_2 находятся в той же самой яме потенциала подложки [см. рис. 5.5(a)], и их координаты $x_{1,2} = \pm x_0$, где величина $x_0 \ll 1$ определяется из стационарного решения уравнения движения

$$m_a \omega_0^2 x_0 + V_{\text{int}}'(2x_0) - V_{\text{int}}'(a_s - x_0) = 0,$$

(мы считаем, что вблизи минимума ямы $V_{\text{sub}}(x) \approx \frac{1}{2} m_a \omega_0^2 x_0^2$). Тогда

$$\varepsilon_k \approx 2V_{\text{sub}}(x_0) + V_{\text{int}}(2x_0) + 2V_{\text{int}}(a_s - x_0) - 3V_{\text{int}}(a_s) \quad (5.49)$$

и

$$\varepsilon_{PN} \approx \left[\varepsilon_s + 2V_{\text{int}}\left(\frac{1}{2}a_s\right) + V_{\text{int}}(a_s) \right] - [2V_{\text{sub}}(x_0) + V_{\text{int}}(2x_0) + 2V_{\text{int}}(a_s - x_0)]. \quad (5.50)$$

В низшем порядке приближения по слабой связи амплитуда ПН потенциала одинакова для кинков и антикинков на фоне любого состояния с концентрацией θ_0 из диапазона $1 < \theta_0 < \frac{3}{2}$. Заметим также что для стандартной модели ФК с $V_{\text{int}} = \frac{1}{2}g(x - a_{\text{min}})^2$ значение $\varepsilon_{PN} \approx 2 - \pi^2 g$ является одним и тем же для всех С-структур ($0 < \theta_0 < \infty$) в первом порядке по g . Более точные результаты в случае слабых связей могут быть получены с использованием техники стандартного отображения [156].

Континуальное приближение

В противоположном случае сильного взаимодействия между атомами, $V_{\text{int}}(a_A) \gg \varepsilon_s$, когда относительные смещения эквивалентных атомов в ближайших соседних ячейках малы $|u_{i,j+1} - u_{i,j}| \ll a$ (хотя относительные смещения ближайших соседних атомов в той же самой ячейке могут быть не малыми если $s \geq 2$), мы можем использовать континуальное приближение

$$j \rightarrow x = ja, \quad u_{i,j}(t) \rightarrow u_i(x, t), \quad i = 1, \dots, s, \quad \sum_j \rightarrow \int \frac{dx}{a}, \quad (5.51)$$

а уравнения движения сводятся к набору связанных s дифференциальных уравнений для функций $u_i(x, t)$ [165, 282, 457]. Методы решения таких систем рассмотрены в параграфе 3.5.2. Заметим только, что мы должны сохранить по крайней мере взаимодействие между s ближайшими соседями. Ниже мы рассмотрим простейший случай тривиального ОС ($s = 1$) с концентрацией $\theta_0 = 1/q$ и с взаимодействием только ближайших соседей соответствующим гармоническому закону

$$V_{\text{int}}(x) \simeq V_{\text{int}}(a) + V_{\text{int}}'(a)(x - a) + \frac{1}{2}V_{\text{int}}''(a)(x - a)^2 \quad (5.52)$$

[далее постоянный член $V_{\text{int}}(a)$ опущен]. В континуальном приближении гамильтониан ФК цепи сводится к

$$H[u] = \varepsilon_0[u] + \int \frac{dx}{a} \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)^2 + \frac{d^2}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + V_{\text{sub}}[u] \right\} \quad (5.53)$$

(повторим, что $a_s = 2\pi$ и $\varepsilon_s = 2$), где

$$\varepsilon_0[u] = V_{\text{int}}'(a) \int dx \frac{\partial u}{\partial x} \quad (5.54)$$

и

$$d = a\sqrt{g_a}. \quad (5.55)$$

Для стандартной модели ФК с $V_{\text{sub}}(u) = 1 - \cos u$, гамильтониан (5.53) приводит к уравнению СГ, кинковое решение которого характеризуется следующими параметрами (см. параграф. 1.2 и 3.1),

$$m = 2/q^2 \pi^2 \sqrt{g_a}, \quad (5.56)$$

$$\varepsilon_k^\sigma = -\sigma a_s V_{\text{int}}'(a) + E_k, \quad E_k = 4\varepsilon_s \sqrt{g_a}, \quad (5.57)$$

$$\varepsilon_{PN} \simeq (8\pi^4/3)\varepsilon_s g_a \exp(-\pi^2 \sqrt{g_a}), \quad (5.58)$$

где $g_a = a_s^2 V_{\text{int}}''(a)/2\pi^2 \varepsilon_s$. Форма кинка может быть соотнесена с плотностью лишних атомов

$$\rho(x) = -\frac{1}{a} \frac{\partial u}{\partial x}, \quad (5.59)$$

так что

$$\int \rho(x) dx = \sigma/q. \quad (5.60)$$

Когда ФК цепочка содержит два кинка с топологическими зарядами σ_1 и σ_2 находящимися на расстоянии R друг от друга, то они взаимодействуют с энергией

$$v_{\text{int}}(R) \simeq 16\sigma_1\sigma_2\varepsilon_s\sqrt{g_a}\exp(-R/d). \quad (5.61)$$

Уравнения (5.56), (5.57), (5.58) и (5.61) справедливы при выполнении условия $g_a \gg 1$. Их можно сравнить с уравнениями полученными в приближении слабого взаимодействия ($g_a \ll 1$) для стандартной ФК модели:

$$m = 1/q^2, \quad (5.62)$$

$$\varepsilon_k^\sigma = -\sigma a_s V'_{\text{int}}(a) + E_k, \quad E_k \simeq \pi^2 g_a (1 - 2g_a) \varepsilon_s, \quad (5.63)$$

$$\varepsilon_{PN} \simeq \varepsilon_s \left(1 - \frac{1}{2} \pi^2 g_a\right), \quad (5.64)$$

$$v_{\text{int}}(R) \simeq 2\pi^2 \sigma_1 \sigma_2 \varepsilon_s \exp(-\xi R/d), \quad (5.65)$$

где численный множитель $\xi(g_a)$ ($\xi < 1$) был рассчитан Джосом [155]. Как было показано в параграфе 6.3.1, $\xi(g) \simeq -\sqrt{g} \ln g$ при $g \ll 1$. Заметим, что для стандартной ФК модели выражения (5.62), (5.63), (5.64), и (5.65) также остается верным при $\theta_0 = 1$.

Кроме однокинкового решения, уравнение СГ имеет стационарное решение в виде кноидальной волны, которое описывает регулярную последовательность равноудаленных кинков. Отталкивание между кинками приводит к уменьшению их ширины

$$d \rightarrow d^* = kd, \quad (5.66)$$

где модуль k , $0 < k \leq 1$, определяется из уравнения

$$Q = g_a^{1/2} 2k \mathbf{K}(k), \quad (5.67)$$

а $\mathbf{K}(k)$ является полным эллиптическим интегралом первого типа, в то время как Q – число атомов на один период кноидальной волны, так что расстояние между кинками равно

$$R = Qa = Qqa_s. \quad (5.68)$$

Вспомним, что кинки являются квазичастицами взаимодействующими через потенциал $v_{\text{int}}(R)$ и находятся под действием периодического ПН потенциала $V_{PN}(X)$ и перейдем в следующем параграфе к процедуре ренормализации.

Ренормализационный подход

Предположим, что мы знаем параметры одиночного кинка в цепочке с простой соразмерной структурой S_0 с концентрацией $\theta_0 = s_0/q_0$. Эта структура может быть промоделирована N_0 атомами распределенными на длине $L_0 = M_0 a_s$ с N_0 и M_0 удовлетворяющими уравнению для целых чисел $N_0 q_0 = M_0 s_0$. Далее, давайте добавим ΔN атомов (или подложку) так, что новая соразмерная структура S будет иметь $N = N_0 + \Delta N$ атомов на той же самой длине L_0 , а концентрация будет равна $\theta = s/q$ с $Nq = M_0 s$. Каждый добавочный атом (или вакансия) будет расщепляться на q_0 кинков. Топологический заряд кинка будет равен $\sigma_k = \text{sign}(\theta - \theta_0)$. Таким образом, структура S может быть рассмотрена как регулярная решетка кинков для соответствующей структуры S_0 , расстояние между кинками

$$R = \frac{L_0}{|N - N_0|q_0} = \frac{a_s}{|\theta - \theta_0|q_0}. \quad (5.69)$$

Рассматривая кинки как квазичастицы находящиеся под действием ПН потенциала с периодом $a_0 = q_0 a_s$ и взаимодействующие между собой через потенциал $v_{\text{int}}(R)$, структуру S можно рассмотреть как новую эффективную ФК цепочку кинков вместо атомов с концентрацией

$$\theta_k = a_0/R = q_0^2 |\theta - \theta_0|. \quad (5.70)$$

Мы обозначим эту структуру как S_k .

Ренормализационная процедура $C \rightarrow C_k$ была предложена Джосом с соавторами [479] (см. также [165]). Результаты этой процедуры представлены в таблице 5.1. Заметим, что при строгом подходе нужно учесть, что параметры кинка для решетки кинков не равны соответствующим параметрам изолированного кинка. Как упоминалось выше, отталкивание кинков приводит к сужению их ширины $d \rightarrow d^* = kd < d$. В результате этого локальные характеристики кинка, такие как эффективная масса m^* и амплитуда ПН потенциала ε_{PN}^* , будут больше чем значения m и ε_{PN} для изолированного кинка. Параметры m^* и ε_{PN}^* могут быть вычислены с помощью уравнений (5.56) – (5.65) при $g \rightarrow g^* = k^2 g < g$.

Таблица 5.1. Редукция сложной C структуры атомов (“первичной” модели ФК) к C_k структуре кинков (“вторичной” ФК модели). Опорная структура C_0 характеризуется безразмерной концентрацией $\theta_0 = s_0/q_0$ и периодом $a_0 = q_0 a_s^{(0)}$, так что безразмерная постоянная упругости $g_a^{(0)} = [a_s^{(0)}]^2 V_{\text{int}}''(a_0)/2\pi^2 \varepsilon_s^{(0)}$, а безразмерный параметр ангармонизма равен $\tilde{\beta}^{(0)} = -a_s^{(0)} V_{\text{int}}'''(a_0)/V_{\text{int}}''(a_0)$.

параметр	C структура	C_k структура
масса частицы	$m_a^{(0)} = m_a$	$m_a^{(1)} = m^*$
координаты	$x_l^{(0)} = x_l$	$x_l^{(1)} = X_l$
взаимодействие	$V_{\text{int}}^{(0)} = V_{\text{int}}(x_{l+1} - x_l)$	$V_{\text{int}}^{(1)} = v_{\text{int}}(X_{l+1} - X_l)$
подложка	$V_{\text{sub}}^{(0)} = V_{\text{sub}}(x)$	$V_{\text{sub}}^{(1)} = V_{PN}(X)$
период	$a_s^{(0)} = a_s$	$a_s^{(1)} = a_0 = q_0 a_s^{(0)}$
высота	$\varepsilon_s^{(0)} = \varepsilon_s$	$\varepsilon_s^{(1)} = \varepsilon_{PN}^*$
покрытие	$\theta^{(0)} = \theta = s/q$	$\theta^{(1)} = \theta_k = s_k/q_k$
порядок	$s^{(0)} = s$	$s^{(1)} = s_k = q_0 s q_0 - s_0 q $
	$q^{(0)} = q$	$q^{(1)} = q_k = q^{(0)}$
период	$a^{(0)} = a = q a_s$	$a^{(1)} = a_k = q a_0 = q q_0 a_s$
среднее расстояние	$a_A^{(0)} = a_A = a/s$	$a_A^{(1)} = R = a_k/s_k$
линейная концентрация	$n^{(0)} = n = a_A^{-1} = \theta/a_s$	$n^{(1)} = n_k = R^{-1}$
постоянная упругости	$g^{(0)} = g = a_s^2 V_{\text{int}}''(a_A)/2\pi^2 \varepsilon_s$	$g^{(1)} = g_k = a_0^2 v_{\text{int}}''(R)/2\pi^2 \varepsilon_{PN}^*$

Таким образом, мы можем “ренормализовать” сложную C структуру к новой C_k структуре кинков определенных на фоне некоторой простой соразмерной структуры C_0 . Затем, кинковое возбуждение структуры C будет эквивалентным кинковому (“суперкинковому”) возбуждению структуры C_k (решетка кинков на фоне структуры C_0). Так, выбирая подходящую фоновую структуру C_0 , такую что $|\theta - \theta_0| \ll \theta_0$, мы можем существенно упростить вычисление параметров кинка сложной структуры C . Процедуру ренормализации можно повторить необходимое число раз. Заметим однако, что форма потенциала подложки $V_{PN}(X)$ так же как и форма закона взаимодействия $v_{\text{int}}(X)$ в ренормализованной ФК цепочке может отличаться от формы в начальной ФК цепи.

5.2.2 Несоразмерные конфигурации

Подход использующий ренормализацию также помогает проанализировать несоразмерные структуры [479]. А именно, ОС с иррациональным θ может быть рассмотрено как кинк решетки на ближайшей соразмерной фазе C_0 . Теперь, однако, ренормализованная ФК цепочка будет иметь структуру C_k , которая снова является несоизмеримой структурой. Следовательно, процедура ренормализации должна здесь повторена бесконечное число раз. В результате мы получим бесконечную последовательность безразмерных значений $g^{(i)}$, определенную как

$$g^{(i)} = \frac{1}{2\pi^2} \frac{(a_s^{(i)})^2}{\varepsilon_s^{(i)}} \left(\frac{d^2}{dx^2} V_{\text{int}}^{(i)}(x) \right)_{x=a_A^{(i)}}. \quad (5.71)$$

Процедура ренормализации имеет две устойчивые фиксированные точки при $g^{(\infty)} = 0$ и $g^{(\infty)} = \infty$ и одну неустойчивую фиксированную точку при $g = g_{\text{Aubry}}(\theta)$. Если начальное значение $g^{(0)} = g$ меньше критического значения $g < g_{\text{Aubry}}(\theta)$, последовательность $g^{(i)}$ стремится к предельной точке $g^{(\infty)} = 0$. Это показывает, что начальная несоразмерная ОС является замкнутым (или закрепленным) на потенциале подложки. Энергия пининга может быть оценена через приближение ОС ближайшей C -конфигурацией. В частности, для стандартной модели ФК энергия пининга равна $\varepsilon_{PN} \simeq 2 - \pi^2 g$ при $g \ll 1$ (напомним, что в этом случае ε_{PN} приблизительно не зависит от структуры ОС). Очевидно, что фононный спектр закрепленного ОС начинается с ненулевого значения $\omega_{\text{min}} > 0$. Движение и локализация фононных мод в пинингованном несоизмеримом ОС было изучено Бурковым и др. [480], Кетоя и Сатия [481] (см. также [482, 483], где обсуждается теплопроводность вдоль цепочки).

В противном случае, если мы начинаем с начального значения $g^{(0)} = g > g_{\text{Aubry}}(\theta)$, последовательность $g^{(i)}$ стремиться к точке $g^{(\infty)} = \infty$, то есть, конечная ренормализованная ФК цепочка соответствует континуальному (СГ) пределу, в котором ПН барьеры равны нулю. Так, в этом случае несоразмерное ОС является “скользящим” (или “настоящим несоизмеримым фазовым” состоянием), его можно свободно сдвинуть приложив любую малую силу к каждому атому [458]. “Скользящая мода” состояния не является обычной акустической модой с нулевым волновым вектором, в которой атомы цепочки или решетка кинков двигаются как одно целое. Для того чтобы объяснить скользящую моду удобно рассмотреть несоизмеримую фазу как предел последовательности С-фаз, так как размер элементарной ячейки здесь стремится к бесконечности. Затем, скользящая мода несоизмеримой фазы соответствует движению единичного кинка в этих соизмеримых фазах, так как ширина кинка стремиться к бесконечности, а амплитуда ПН потенциала стремиться к нулю.

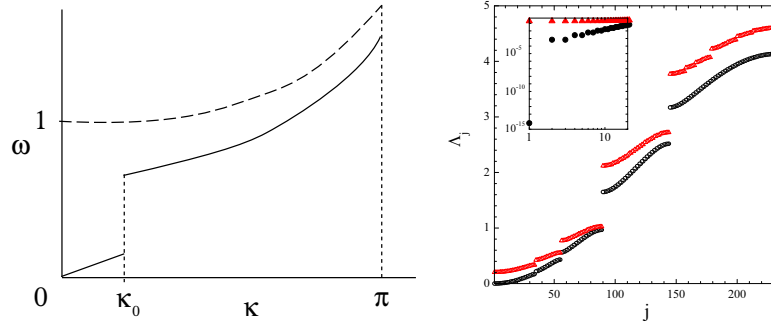


Рис. 5.7. Левая панель: фононный спектр Несоразмеримые фазы в пределе континуального приближения (схематическое представление). Пунктирная кривая описывает оптический фононный спектр тривиального ОС, $\kappa_0 \approx \pi a_s/R$, R – расстояние между кинками в кноидальной волне соответствующей несоизмеримой фазе. Правая панель: спектр собственных значений линейной матрицы устойчивости ($\Delta_j = \omega_j^2$) для “несоразмерного” ОС с $w = 144/233$ выше и ниже перехода Обри: треугольники для $K \equiv g^{-1} = 1.5 > K_c$ (ниже перехода Обри, закрепленное состояние) и кружки для $K = 0.7 < K_c$ (выше точки перехода, скользящее состояние). Вставка показывает голдстоуновскую моду и щель при κ_0 [487].

Для изучения фононного спектра ОС, подставим функции

$$x_l(t) = x_l^{\text{GS}} + \chi_l(t), \quad \chi_l(t) \propto \exp(i\omega t - i\kappa l) \quad (5.72)$$

в уравнение движения, и затем линеаризуем полученное уравнение для малых смещений $\chi_l(t)$. В пределе континуального приближения, когда несоразмерное основное состояние x_l^{GS} представлено кноидальной волной с расстоянием R между кинками, уравнение для $\chi(x, t)$ сводится к уравнению Ламе

$$\frac{\partial^2 \chi}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 \chi}{\partial x^2} - \cos[u^{\text{GS}}(x)] \chi = 0. \quad (5.73)$$

Уравнение (5.73) точно решается через эллиптические функции Якоби [484]. Из этого следует, что фононный спектр состоит из двух ветвей (см. рис. 5.7, левая панель) [447, 455, 457, 485, 486]. Для малых волновых векторов $\kappa \ll \kappa_0$, где $\kappa_0 \simeq \pi a_s/R$, имеется акустическая ветвь с законом дисперсии

$$\omega(\kappa) = c_s \kappa, \quad (5.74)$$

где скорость звука c_s равна

$$c_s = g^{1/2}(1 - k^2)^{1/2} \mathbf{K}(k)/\mathbf{E}(k), \quad (5.75)$$

$\mathbf{K}(k)$ и $\mathbf{E}(k)$ – полные эллиптические функции первого и второго типа, соответственно, а k – модуль определяемый из уравнения (5.67). Эта мода описывает коллективному движению кинков в кноидальной волне и при $\kappa \rightarrow 0$ она соответствует сдвиговой моде. Для больших волновых векторов, $\kappa \geq \kappa_0$, фононный спектр будет оптическим, аналогично соответствующей части спектра ближайшей С-фазы, разделенной кинками в кноидальной волне. Акустические и оптические ветви отделены друг от друга запрещенной щелью при волновом векторе κ_0 (в существенно несоизмеримом ОС $\kappa_0 \rightarrow 0$). Заметим, что для дискретной ФК цепи оптическая ветвь является более сложной, так как она состоит из бесконечного числа подветвей разделенных запрещенными щелями (см. рис. 5.7, правая панель).

Используя теорию КАМ и топологические аргументы, Обри с соавторами [56, 443, 460, 463] доказали, что для дискретной ФК цепи с строго выпуклым потенциалом $V_{\text{int}}(x)$ несоразмерное ОС может быть параметризовано одной или двумя функциями $h(x)$,

$$x_l = h(la_A + \beta), \quad (5.76)$$

где β – произвольная фаза, такая что потенциальная энергия $\varepsilon(\{x_l\})$ не зависит от β . Функция остова (the hull function) $h(x)$ явно зависит от концентрации θ (или от w). Она описывает структуру атомов на расстоянии a_A , которая модулирована функцией $\phi(x)$,

$$\phi(x) = h(x) - x. \quad (5.77)$$

Эта функция является периодической с тем же периодом a_s как и потенциал подложки $V_{\text{sub}}(x)$. Выше критического значения, $g > g_{\text{Aubry}}(\theta)$, функция $h(x)$ является непрерывной (аналитической). Однако, когда параметр g меньше порогового значения $g_{\text{Aubry}}(\theta)$, система совершает резкий переход нарушая аналитичность, и функция $h(x)$ становится разрывной на плотном множестве точек, которые образуют канторовское множество (см. рис. 5.8). Ниже дается два возможных определения функции остова $h(x)$, функция $h^+(x)$, являющаяся непрерывной справа, и $h^-(x)$, которая непрерывна слева:

$$\lim_{\delta \rightarrow 0^+} h^-(x + \delta) = h^+(x), \quad \lim_{\delta \rightarrow 0^-} h^+(x + \delta) = h^-(x). \quad (5.78)$$

Обе эти функции $h^\pm(x)$ определяют тоже самое ОС. Их можно записать как сумму ступенчатых функций Хевисайда,

$$h^\pm(x) = \sum_l h_l \Theta^\pm(x - x_l), \quad (5.79)$$

где h_l амплитуда ступенчатой функции с центром в точке x_l [по определению $\Theta^\pm(x) = 0$ для $x < 0$, $\Theta^\pm(x) = 1$ для $x > 0$, и $\Theta^+(0) = 1$, $\Theta^-(0) = 0$].

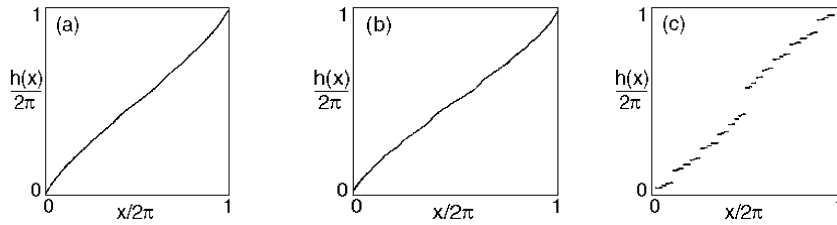


Рис. 5.8. Hull function $h(x)$ при (a) незакрепленной $g > g_{\text{Aubry}}$, (b) критической $g = g_{\text{Aubry}}$ и (c) закрепленной фазой $g < g_{\text{Aubry}}$ для золотого значения w [488]. При $g = g_{\text{Aubry}}$, $h(x)$ имеет фрактальную структуру.

Переход нарушения аналитичности можно интерпретировать следующим интуитивным способом [463, 489, 490]. Ясно, что в пределе $g \rightarrow 0$ все атомы в ОС будут лежать вблизи к минимуму потенциала подложки $V_{\text{sub}}(x)$. Поэтому, для смещения цепи на дискретную величину в новое положение с той же самой (наименьшей) потенциальной энергией, по крайней мере один атом должен перепрыгнуть из одной впадины потенциала $V_{\text{sub}}(x)$ в другую через ее максимум (вершину). В результате этого, ОС остается закрепленным, наименьшая частота фононов ω_{min} является ненулевой, и для смещения цепи нужно к каждому ее атому приложить ненулевую силу F_{PN} (известную как силу депининга). С другой стороны, ОС будет незакрепленным (как это должно быть по крайней мере в пределе $g \rightarrow \infty$) если и только если в ОС имеются атомы произвольно близкие к вершине потенциала $V_{\text{sub}}(x)$. Таким образом, удобно вести параметр “беспорядка” ψ , определенный как минимальное расстояние от любого атома до ближайшей вершины потенциала подложки

$$\psi = \min_{l,j} \left| x_l - \left(j + \frac{1}{2} \right) a_s \right|. \quad (5.80)$$

Компьютерное моделирование показывает, что вблизи критической точки переход от закрепленных к скользящим основным состояниям происходит согласно степенному закону

$$\psi, d, \omega_{\text{min}}, E_{PN}, F_{PN} \propto (g_{\text{Aubry}} - g)^\chi, \quad (5.81)$$

где порог g_{Aubry} и критические супер-экспоненты $\chi...$ зависят от концентрации θ (или от параметра соразмерности w). В частности, для золотого среднего $w = w_{\text{gm}} \equiv (\sqrt{5} - 1)/2$, когда $K_{\text{Aubry}} = g_{\text{Aubry}}^{-1} = 0.971635406$ (см. ссылку [476]), было получено, что $\chi_\psi \approx 0.7120835$ для параметра беспорядка [наибольшая щель в функции (5.76)], $\chi_d \approx -0.9874624$ для связанной длины, $\chi_{\omega_{\text{min}}} \approx 1.0268803$ для фононной щели ω_{min} , и $\chi_{PN} \approx 3.0117222$ для ПН энергетического барьера и силы депинингования (см. также ссылки [463, 467, 476, 489], [490]–[493]). Заметим, что этот переход демонстрирует скейлинговую зависимость как у критических явлений.

Выше показатели степени названы супер-критическими так как они становятся нулями для скользящего основного состояния $g > g_{\text{Aubry}}$. С другой стороны, можно вести субкритические показатели и для скользящих состояний выше перехода Обри. Одним из них является “сжимаемость” $C = (\partial w / \partial P)_g$, которая может быть

представлена как $C(g) \propto (g - g_{\text{Aubry}})^{\chi_c}$ с $\chi_c \approx 0.049328$ для золотого среднего параметра соразмерности. В СГ пределе ($K \rightarrow 0$ или $g \rightarrow \infty$) мы имеем $w(P) = P$, так что $C = 1$. В существенно несоизмеримом ОС, $g > g_{\text{Aubry}}$, C уменьшается с g и становится нулевым для закрепленного ОС, когда дьявольская лестница является полной, а функция $w(P)$ имеет везде нулевой наклон. Другой важной субкритической величиной является эффективная вязкость $\Gamma = \lim_{F \rightarrow 0} F/v$, которая описывает среднее значение установившейся скорости движения $v = \langle \dot{x}_l \rangle$ при приложении бесконечно малой постоянной силы F ко всем атомам цепи (для того чтобы избежать бесконечное ускорение нужно в уравнение движения включить внешнее трение η). Величина Γ является нулевой в СГ пределе ($g \rightarrow \infty$, или $K \rightarrow 0$) и расходится при переходе Обри. Для золотого значения параметра соразмерности можно получить

$$\Gamma(g) \propto (g - g_{\text{Aubry}})^{-\chi_\Gamma} \quad (5.82)$$

с $\chi_\Gamma \approx 0.029500$. Критические показатели связаны соотношениями скэйлинга [476, 491, 493]

$$2\chi_{\omega_{\min}} + \chi_d = \chi_\Gamma + \chi_{PN}, \quad (5.83)$$

$$\chi_c = \chi_{PN} - 3\chi_d. \quad (5.84)$$

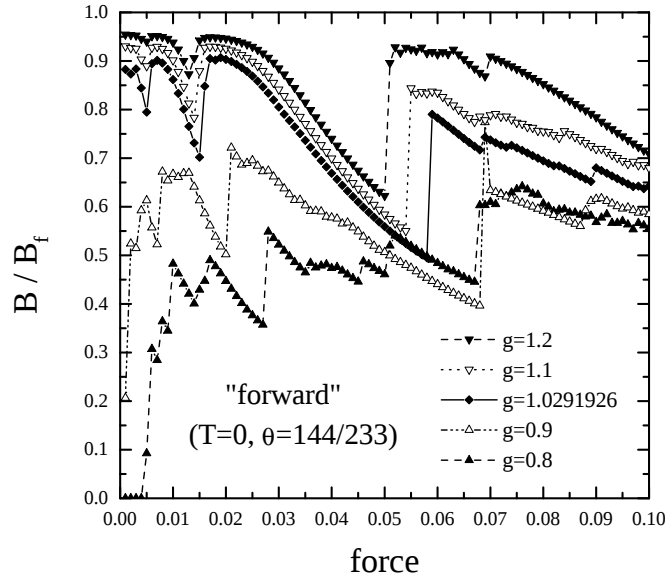


Рис. 5.9. Подвижность $B = v_{\text{с.м.}}/F$, нормализованная относительно значения для свободного движения $B_f = (m_a \eta)^{-1}$, как функция от постоянной силы F для классической модели ФК с концентрацией $\theta = 144/233$ для различных значений постоянной упругости g ниже и выше порога Aubry $g_{\text{Aubry}} \approx 1.0291926$. В уравнение движения включено внешнее вязкое трение с коэффициентом $\eta = 0.1$.

Бихам и Мукамель [494] численно изучили пороговое значение g_{Aubry} и критические экспоненты $\chi_{\dots}$ как функции от w . Они нашли что критическая кривая $g_{\text{Aubry}}(w)$ имеет фрактальную природу и характеризуется размерностью Хаусдорфа 0.87 ± 0.02 .

Настоящее несоизмеримое ОС, $g > g_{\text{Aubry}}$, часто называемое “состоянием с нулевым трением”, так как цепочка начинает свободно скользить, когда произвольно малая постоянная сила приложена ко всем атомам. Подобное движение без трения (также называемое “сверхсмазанным”) существует однако только в СГ пределе ($g \rightarrow \infty$) и, кроме того, только для бесконечно малых значений скорости центра масс (с.м.), $v_{\text{с.м.}} \rightarrow 0$, где $v_{\text{с.м.}} = \dot{X}$, $X = N^{-1} \sum_l x_l$. Как можно видеть из рис. 5.9, скорость центра масс меньше чем максимальное значение $v_f = F/m_a \eta$, согласно уравнению (5.82), даже в пределе $F \rightarrow 0$. При любом конечном значении скорости $v_{\text{с.м.}} > 0$, кинетическая энергия движения центра масс уменьшается из-за возбуждения фононов, хотя на очень больших временах, для некоторых интервалов значений скорости (заметим, что при моделировании короткой цепи, когда ее фононный спектр является дискретным, сверхсмазывание можно наблюдать для некоторых окон значений скорости). Механизм этого трения, однако, является более тонким [495]. В настоящем несоизмеримом состоянии конфигурация (5.76) соответствует промодулированному из-за потенциала подложки равноотстоящему размещению атомов (шаг a_A) с волновым вектором $\kappa_s = 2\pi/a_s$ (и ее высшими гармониками $n\kappa_s$). В случае $g \gg 1$, амплитуды модуляций scales as K^n , где $K \equiv g^{-1} \ll 1$, и может быть рассмотрена как “запрещенные” фононы с частотами $\omega_{n\kappa_s}$, где $\omega_q = 2\sqrt{g} \sin(qa_A/2)$ – фононный спектр упругой цепи потенциала подложки. Теперь, если такая конфигурация будет скользить как целое со скоростью центра масс $v_{\text{с.м.}}$, ее

атомы будут преодолевать максимумы потенциала подложки с частотой $\omega_{\text{wash}} = (2\pi/a_s) v_{\text{c.m.}}$. Последующее уменьшение скорости движения центра масс происходит через два этапа. В начале движения, связь сдвиговой моды с модой пинингованного состояния ω_{κ_s} (и/или ее высшими гармоникам) приводит к длинноволновым осцилляциям (из-за *параметрического* резонанса Матье) с частотой $\Omega \sim |\omega_{\text{wash}} - \omega_{\kappa_s}|$ (но не с частотой подложки ω_{wash} как можно наивно предположить). Затем, на втором этапе, эти длинноволновые колебания возбуждают сложный параметрический резонанс, который определяется *несколькими* резонансными модами (см. детали в работе [495]).

5.3 Цепочка со свободными концами

Если ОС ФК цепи с “фиксированной плотностью” определяется двумя параметрами g и θ , то ОС цепочки со “свободными концами” определяется параметрами g и P [значение параметра несоответствия P определено в уравнении (5.4)] и соответствует абсолютному минимуму потенциальной энергии

$$\begin{aligned} E(P, N) &= U_{\text{sub}} + U_{\text{int}}, \\ U_{\text{sub}} &= \sum_{l=1}^N V_{\text{sub}}(x_l), \\ U_{\text{int}} &= \sum_{l=2}^N V_{\text{int}}(x_l - x_{l-1}), \end{aligned} \quad (5.85)$$

где один или два конца цепи остаются свободными, и берется предел $N \rightarrow \infty$. Ясно, что цепочка со свободными концами может существовать только если межатомный потенциал $V_{\text{int}}(x)$ имеет притягивающую ветвь. Для того чтобы избежать это ограничение предположим, что цепочка находится под действием одномерного внешнего “давления” Π (без учета напряжения), которое позволяет изменять расстояние между соседними атомами. В этом случае мы должны искать минимум, который позволяет изменить расстояние между соседними атомами. В этом случае мы должны искать минимум энтальпии

$$W(\Pi, N) = E + \Pi L, \quad (5.86)$$

где L общая длина цепи,

$$L = \sum_{l=2}^N (x_l - x_{l-1}) = x_N - x_1, \quad (5.87)$$

так что Π является термодинамически сопряженной к пространственной переменной L . (Напомним, что при нулевой температуре потенциальная энергия E совпадает со свободной энергией Гельмгольца F , а энтальпия W со свободной энергией Гиббса G). Для стандартной ФК модели с $V_{\text{int}}(x) = \frac{1}{2}g(x - a_{\text{min}})^2$ следует, что

$$\begin{aligned} U_{\text{int}} + \Pi L &= \sum_{l=2}^N \left\{ \frac{1}{2}g(x_l - x_{l-1} - a_{\text{min}})^2 + \Pi(x_l - x_{l-1}) \right\} \\ &= \sum_{l=2}^N \left\{ \frac{1}{2}g(x_l - x_{l-1} - a'_{\text{min}})^2 + \Pi'(x_l - x_{l-1}) \right\} + C, \end{aligned} \quad (5.88)$$

где постоянная $C = \frac{1}{2}g(N-1) \left[a_{\text{min}}^2 - (a'_{\text{min}})^2 \right]$, а старая и новая функции давления связаны соотношением

$$\Pi - ga_s P = \Pi' - ga_s P'. \quad (5.89)$$

Таким образом цепочка с $P = 0$ находящаяся под действием внешнего давления Π , эквивалентна цепочке с $P = -\Pi/ga_s$, находящейся под действием нулевого внешнего давления. Следовательно, описание в котором g и P являются главными переменными и описание где главными переменными являются g и Π эквивалентны друг другу. Заметим также, что когда модель ФК описывает цепочку маятников [496, 497], x_l означает угол вращения, а L является полным средним фазовым сдвигом создаваемым “закручиванием” Π .

Также имеется альтернативное описание, в котором необходимо найти ОС цепочки как равновесное состояние частиц с заданным химическим потенциалом μ . В этом подходе мы должны минимизировать функцию

$$J(L, \mu) = E - \mu N, \quad (5.90)$$

с полным числом атомов определенным как $N = \partial J / \partial \mu$. Таким образом, задача нахождения ОС для цепи ФК со “свободными концами” сводится к построению фазовой диаграммы системы в одной из фазовых ФК плоскостей (g, P) , (g, Π) или (g, μ) . В этом параграфе мы обсуждаем стандартную модель ФК. Так как поведение этой модели является одинаковым для любых значений целого q_0 в определении P [см. уравнение (5.4)], то достаточно рассмотреть только случай с $q_0 = 1$. Более того, стандартная модель ФК является симметричной относительно знака параметра несоответствия P (кинк-антикинк-овая симметрия), так что изменение P можно ограничить интервалом $0 \leq P \leq \frac{1}{2}$.

5.3.1 Переход Франка-ван-дер-Мерве

Когда значение $a_{\min}$ совпадает или близко к периоду внешнего потенциала a_s , так что $P \simeq 0$, ОС цепочки ФК со “свободными концами” является тривиальным. Давайте теперь в это тривиальное состояние через свободный конец цепи запустим кинк с топологическим зарядом $\sigma = -\text{sign}P$. В результате этого энергия системы изменится на величину [см. уравнения (5.57) и (5.63)]

$$\varepsilon_k = -|P|ga_s^2 + E_k, \quad E_k \simeq \begin{cases} 2\pi^2g(1-2g) & \text{если } g \ll 1, \\ 8\sqrt{g} & \text{если } g \gg 1. \end{cases} \quad (5.91)$$

Конфигурация ОС будет оставаться тривиальной пока $\varepsilon_k > 0$, или $|P| < P_{FM}$, где критическое значение P_{FM} определяется из уравнения $\varepsilon_k = 0$, так что

$$P_{FM} \simeq \begin{cases} \frac{1}{2}[1-2g/(1+3g)] & \text{если } g \ll 1, \\ 2/\pi^2\sqrt{g} & \text{если } g \gg 1. \end{cases} \quad (5.92)$$

Однако выше критического значения P_{FM} выполняется неравенство $\varepsilon_k < 0$ и создание кинков будет приводить к понижению энергии цепи. (В этом параграфе термин кинк используется для обозначения кинковой конфигурации на фоне структуры с $\theta_0 = 1$. Для того чтобы избежать путаницы, мы будем использовать термин “суперкинк” для конфигурации с кинком на фоне структуры с сложной элементарной ячейки). Отталкивание кинков характеризуется энергией

$$v_{\text{int}}(R) \simeq 32\sqrt{g}\exp(-R/d), \quad g \gg 1, \quad (5.93)$$

где $d = a_s\sqrt{g}$ задает предел для плотности кинков. Так при $P_{FM} < |P| < \frac{1}{2}$ цепочка со свободным концом будет расширяться или сжиматься с целью уменьшения своей потенциальной энергии, а конфигурация ОС будет описываться кноидальной волной, то есть бесконечной последовательностью кинков отделенных друг от друга на расстояние R_0 . Этот шаг последовательности кинков определяется из уравнения $v_{\text{int}}(R_0) + \varepsilon_k = 0$, так что

$$R_0 \simeq d \ln \left(\frac{4P_{FM}}{|P| - P_{FM}} \right), \quad g \gg 1. \quad (5.94)$$

Этот переход из тривиального ОС к ОС имеющего структуру “кноидальной волны” впервые был рассмотрен Франк ван дер Мерве [31]. В литературе он известен как переход соизмеримость-несоизмеримость [456, 457]. Однако, это название может привести к путанице, так как для любого $g < \infty$ (за исключением только предельного случая $g = \infty$) переход происходит между двумя С-фазами, между соразмерным тривиальным и соразмерным основным состоянием более высокого порядка (см. следующий параграф). Поэтому мы будем называть этот переход как “переход Франка ван дер Мерве (ФвдМ-переход)”. Рассмотрим теперь его более детально, следуя довольно поучительной оригинальной работе Франка ван дер Мерве [31].

Давайте рассмотрим вначале бесконечную ФК цепь и пренебрежем граничными условиями. Устойчивые конфигурации цепи определяется уравнением

$$g(x_{l+1} + x_{l-1} - 2x_l) = \sin x_l, \quad (5.95)$$

которое в континуальном пределе ($g \gg 1$, $x_l = la_s + u_s$, $l \rightarrow x = la_s$, $u_l \rightarrow u(x)$) сводится к уравнению маятника

$$\frac{d^2u}{d\tilde{x}^2} = \sin u, \quad (5.96)$$

где мы ввели безразмерную переменную $\tilde{x} = x/d$, $d = a_s\sqrt{g}$. Решение уравнения (5.96) описывает конфигурацию с потенциальной энергией

$$E[u] = \sqrt{g} \int d\tilde{x} \varepsilon[u(\tilde{x})], \quad \varepsilon[u] = \frac{1}{2} \left(\frac{du}{d\tilde{x}} - Pd \right)^2 + (1 - \cos u). \quad (5.97)$$

Уравнение (5.96) имеет два важных решения. Первое соответствует тривиальной конфигурации $u^{(\text{tr})}(\tilde{x}) = ja_s, j = 0, \pm 1, \dots$, в которой одному шагу цепочки соответствует энергия

$$\varepsilon^{(\text{tr})} \equiv E[u^{(\text{tr})}]/L = P^2 d^2 / 2a_s. \quad (5.98)$$

Второе решение описывает кноидальную волну

$$u^{(\text{cw})}(\tilde{x}) = \pi + 2 \sin^{-1} \text{sn} \{ -\sigma(\tilde{x} - \beta)/k, k \}, \quad (5.99)$$

где $\text{sn}(z, k)$ – синус функция Якоби, k – ее модуль ($0 < k \leq 1$), β – произвольная фаза, которая показывает возможность свободного скольжения бесконечной цепочки в СГ пределе. Кноидальная волна описывает конфигурацию с регулярной последовательностью кинков, имеющих топологический заряд $\sigma = -\text{sign}P$, а расстояние R между кинками определяется модулем k ,

$$R = 2dk\mathbf{K}(k), \quad (5.100)$$

так что плотность лишних (недостающих) атомов

$$\rho(x) = -\frac{u_x}{a_s} = \frac{\sigma}{\pi d} \left\{ \frac{(1-k^2)}{k^2} + \frac{1}{2} \left[1 - \cos u^{(\text{cw})}(x) \right] \right\}. \quad (5.101)$$

Функция $\rho(x)$ является периодической с периодом R . Кноидальная волна (5.99) имеет на одном периоде энергию

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\text{pp}}^{(\text{cw})} &= \sqrt{g} \int_0^{R/d} d\tilde{x} \varepsilon \left[u^{(\text{cw})}(\tilde{x}) \right] \\ &= \sqrt{g} \left\{ P^2 d^2 k \mathbf{K}(k) - 2\pi |P| d - \frac{4}{k} (1-k^2) \mathbf{K}(k) + \frac{8}{k} \mathbf{E}(k) \right\}, \end{aligned} \quad (5.102)$$

так что энергия на единицу длины равна

$$\varepsilon^{(\text{cw})} = \varepsilon_{\text{pp}}^{(\text{cw})}/R = \varepsilon^{(\text{tr})} - \frac{1}{a_s} \left\{ 2 \frac{(1-k^2)}{k^2} + \frac{\pi |P| d}{k \mathbf{K}(k)} - \frac{4 \mathbf{E}(k)}{k^2 \mathbf{K}(k)} \right\}. \quad (5.103)$$

Очевидно, что период ОС конфигурации R должен минимизировать энергию (5.103). Таким образом, из уравнения $\partial \varepsilon^{(\text{cw})} / \partial k = 0$ следует уравнение

$$\frac{\mathbf{E}(k)}{k} = \frac{\pi}{4} |P| d \equiv \frac{|P|}{P_{FM}}. \quad (5.104)$$

Решение уравнения (5.104), при $k = k_0$, определяет период R_0 [через уравнение (5.100)] и энергию на единицу длины

$$\varepsilon_0^{(\text{cw})} = \varepsilon^{(\text{tr})} - \frac{2}{a_s} \frac{(1-k_0^2)}{k_0^2}, \quad (5.105)$$

ОС с конфигурацией “кноидальной волны” в пределе континуального приближения. Заметим, что уравнение (5.104) имеет решение, следовательно кноидально-волновое ОС имеет меньшую энергию чем тривиальное ОС, если и только если $|P| > P_{FM}$ в соответствии с предыдущим обсуждением.

Теперь давайте вернемся к граничному условию свободных концов следуя элегантному подходу Франка ван дер Мерве [19]. Рассмотрим стационарную конфигурацию бесконечной цепи и предположим что пружина связывающая N -ый и $(N+1)$ -ый атомы не растянута, то есть $x_{N+1} - x_N = a_{\min}$. Тогда мы можем разорвать эту пружину без изменения положения всех атомов цепи. В результате этого мы получим две полубесконечные цепи, каждая из которых имеет один свободный конец и находится в стационарном состоянии. Таким образом мы переходим к граничному условию $u_{N+1} - u_N = Pa_s$ или, в пределе континуального приближения, к

$$\left. \frac{du}{d\tilde{x}} \right|_{\tilde{x}=\tilde{x}_{\text{end}}} = Pd. \quad (5.106)$$

Подставляя кноидальную волну (5.99) в уравнение (5.106) мы получим соотношение

$$\frac{1}{k} \text{dn} \left(\frac{\tilde{x}_{\text{end}} - \beta}{k}, k \right) = \frac{1}{2} |P| d, \quad (5.107)$$

где $\tilde{x}_{\text{end}} = Na_s/d$ – координата свободного конца. Это граничное условие приводит к нескольким интересным следствиям. interesting consequences.

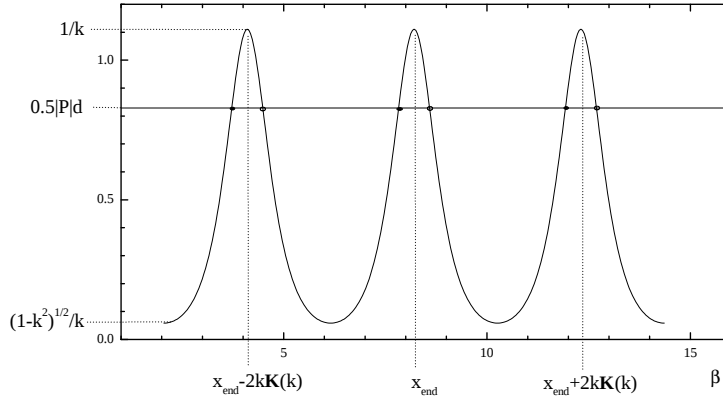


Рис. 5.10. Графическое решение уравнения (5.107). Заполненные и пустые круги соответствуют устойчивым и неустойчивым конфигурациям цепи.

При любом $P \neq 0$ тривиальное решение $u^{\text{tr}}(\tilde{x}) = \text{const}$ не удовлетворяет уравнению (5.106). Это значит, что близко к концу цепи (на расстоянии $|x - x_{\text{end}}| \leq d$) тривиальная конфигурация ОС является всегда “возмущенной”, то есть атомы вблизи конца сдвинуты далеко от минимумов потенциала подложки. Таким образом, тривиальная конфигурация ОС в пределе $k \rightarrow 1$ (или $R_0 \rightarrow \infty$) *всегда* описывается кноидальной волной (5.99), в то время как энергия остается равной $\varepsilon^{(\text{tr})}$ [Eq. (5.98)].

Соотношение (5.107) представляет собой уравнение на фазу β . Как показано на рис. 5.10, это уравнение имеет два решения [оба определены с точностью до дополнительной константы, которая является кратной $2kK(k)$], одно соответствует устойчивой конфигурации, а другое – неустойчивой. Следовательно, фаза β кноидально-волнового ОС фиксирована, это означает, что *свободный конец ФК цепочки всегда закреплен* даже в СГ пределе $g \rightarrow \infty$, когда отсутствует ПН барьер. Заметим, что это является следствием того что уравнение СГ с граничными условиями свободных концов не является точно интегрируемым уравнением (в противоположность случаю периодических граничных условий при котором уравнение СГ является точно интегрируемым). В результате этого скользящая мода отсутствует в ФК цепочки со “свободными концами” при любых значениях параметров модели, а для скольжения цепочки всегда требуется энергия активации [447, 458]. Потенциальная энергия цепи со свободными концами является периодической функцией (с периодом a_s) от положения концевых атомов цепи. Амплитуда колебаний потенциальной энергии ε_{pin} конечна в пределе $L \rightarrow \infty$. Конечно, энергия на единицу длины продолжает определяться уравнением (5.105), так как $\lim_{L \rightarrow \infty} \varepsilon_{\text{pin}}/L = 0$.

Уравнение (5.107) имеет решение если (см. рис. 5.10)

$$\frac{\sqrt{1-k^2}}{k} < \frac{1}{2}|P|d < \frac{1}{k}. \quad (5.108)$$

В частности, тривиальная конфигурация ($k \rightarrow 1$) разрешена пока

$$|P| < P_{ms} \equiv 2/d. \quad (5.109)$$

Таким образом, тривиальная конфигурация цепи со свободными концами остается устойчивой пока параметр несоответствия P_{FM} больше второго критического значения P_{ms} . В пределах интервала $P_{FM} < |P| < P_{ms}$ тривиальная конфигурация соответствует метастабильному состоянию системы, так как при $|P| < P_{ms}$ для вставки в цепь через свободный конец кинка необходимо преодолеть энергию активации. Вдали от метастабильного предела P_{ms} (то есть, в пределах интервала $P_{ms} < |P| < \frac{1}{2}$) тривиальная конфигурация становится неустойчивой, так как кинки будут самопроизвольно образовываться на свободных концах цепи.

5.3.2 Дьявольская лестница и фазовая диаграмма

Теперь мы уже можем построить всю фазовую диаграмму для ОС структуры ФК цепи со свободными концами. Как показано выше, в интервале $0 \leq |P| < P_{FM}(g)$ ОС является тривиальным ($\theta = 1$ и $w = 0$), в то время как в интервале $P_{FM}(g) < |P| \leq \frac{1}{2}$ ОС соответствует кноидальной волне кинков расположенных на расстоянии R_0 друг от друга, так что

$$\theta = \frac{R_0/a_s + \sigma}{R_0/a_s} = 1 + \frac{\sigma a_s}{R_0} \quad \text{and} \quad w = \left\{ \frac{R_0}{R_0 + \sigma a_s} \right\}. \quad (5.110)$$

Таким образом, при данном значении параметра g , любое значение параметра несоответствия P (или давления Π , или химического потенциала μ) определяет единственное значение концентрации θ (или параметра соразмерности w), а структура ОС совпадает со структурой описанной в параграфе 5.2.1 для того же значения θ (везде кроме концов цепи, где на расстоянии $|x - x_{\text{end}}| \leq d$ от свободных концов структура всегда оказывается возмущенной). Ясно, что значение $w(g, P)$ может быть как рациональным, так и иррациональным числом, соответствующим либо соизмеримой или несоизмеримой фазе. Напомним что кинки в кноидальной волне могут быть рассмотрены как квазичастицы расположенные на периодическом ПН потенциале, взаимодействующие между собой по экспоненциальному закону $v_{\text{int}}(X)$. Поэтому, мы снова можем использовать ренормализационный подход Джоса с соавторами (1983). Теперь мы должны одновременно нормализовать два модельных параметра $(g^{(i)}, P^{(i)}) \rightarrow (g^{(i+1)}, P^{(i+1)})$, где постоянная упругости $g^{(i)}$ задается взаимодействием между квазичастицами, а параметр несоответствия $P^{(i)}$ определяется расстоянием между квазичастицами вместо параметра a_{min} в уравнении (5.4). Если ренормализационная последовательность, начинающаяся из точки (g, P) , заканчивается в устойчивой неподвижной точке $(g^{(\infty)}, P^{(\infty)})$ с $g^{(\infty)} = \infty$, то ОС системы будет соответствовать несоизмеримой фазе. В противном случае ОС будет соразмерным. Таким образом, фазовая плоскость (g, P) будет разделена на две области в которых ОС имеет либо соизмеримую, либо несоизмеримую структуру. Ясно, что несоизмеримая фаза может существовать только в области $g > g_c \equiv \min_w g_{\text{Aubry}}(w)$.

Используя идеологию предыдущего параграфа легко догадаться что так же как и тривиальная конфигурация, каждая соразмерная конфигурация с рациональным $w = r/s$ будет устойчивой в конечном интервале

$$P_{ms}^-(w) < |P| < P_{ms}^+(w). \quad (5.111)$$

Она должна соответствовать ОС системы в более узком интервале

$$P_{FM}^-(w) < |P| < P_{FM}^+(w). \quad (5.112)$$

В самом деле, рассматривая соразмерную структуру w как фоновую конфигурацию, мы можем определить суперкинки (супер-антикинки) с топологическими зарядами $\sigma = 1$ ($\sigma = -1$). Согласно главе 3, энергию рождения суперкинка можно представить как

$$\varepsilon_k^\sigma = -\sigma g a_s^2 (|P| - P_0(w)) + E_k(w), \quad (5.113)$$

где $P_0(w)$ и $E_k(w)$ являются постоянными зависящими от w . Предельные значения $P_{FM}^\pm(w)$ определяются из уравнения $\varepsilon_k^\sigma = 0$,

$$P_{FM}^\pm(w) = P_0(w) \pm E_k(w)/g a_s^2. \quad (5.114)$$

Конфигурация ОС не зависит от величины P пока значение этого параметра остается между двумя предельными значениями $P_{FM}^\pm(w)$. Вне этих пределов плато энергии рождения суперкинка становится отрицательным, делая тем самым метастабильной w конфигурацию (см. Рис. 5.11). Новое ОС будет соответствовать конечной плотности суперкинков, с плотностью определяемой конкуренцией между отрицательной энергией рождения (которая способствует появлению как можно большому числу суперкинков) и положительной энергией отталкивания суперкинков (которая возрастает при сближении суперкинков). Таким образом, функция $w(P)$ состоит из множества “плат”, или “террас” на которых число w как функция P остается постоянной (см. Рис. 5.1). Это происходит при рациональных значениях $w = r/s$, а длины этих плат стремятся стать как можно меньшими, так как период q соразмерной структуры увеличивается из-за уменьшения значения $E_k(w)$ в уравнении (5.114).

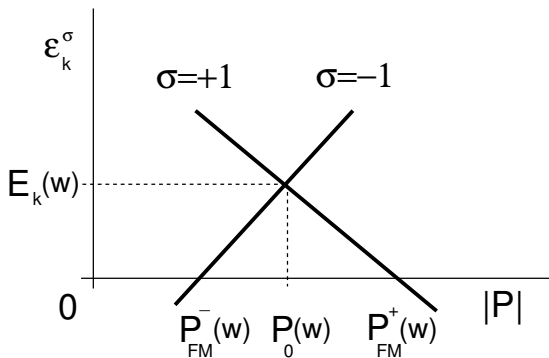


Рис. 5.11. Энергия рождения суперкинка ($\sigma = +1$) и супер-антикинка ($\sigma = -1$) для фоновой конфигурации с $w \neq 0$ как функции от параметра несоответствия P .

Обри с соавторами в серии работ (см. статью [460] и приведенные в ней ссылки) доказали что функция $w(P)$ всегда является непрерывной, вопреки тому, что можно было предположить из простого взгляда на

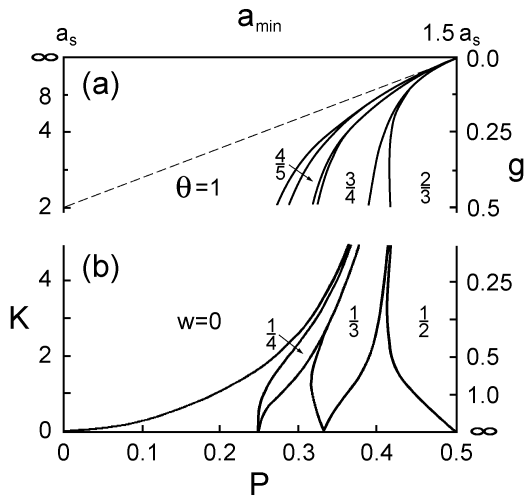


Рис. 5.12. Фазовая диаграмма для стандартной модели ФК в (a) плоскости $(a_{\min}, g)$ и (b) плоскости (P, K) , где $K = g^{-1}$ [276].

Рис. 5.1. Следовательно, функция $w(P)$ принимает иррациональные значения когда P лежит между соседними террасами, так что в этом случае значения w имеет однозначное соответствие между значениями w и P .

Аналогично, концентрация θ как функция параметра несоответствия P фиксируется на всех соразмерных значениях $\theta = s/q$, и в противоположность P кривая $\theta(P)$ является непрерывной монотонно убывающей. Согласно Мандельброту [444], такая кривая известна как дьявольская лестница. Обри и соавторы (см статью [460], и работы [498]–[500]) доказали, что при $g < g_c$ функция $\theta(P)$ принимает несоразмерные значения на множестве нулевой меры значений P , а кривая $\theta(P)$ является полной дьявольской лестницей. [По определению, дьявольская лестница называется полной когда она полностью состоит из ступенек, или что эквивалентно когда функция $\theta(P)$ имеет нулевую производную почти везде за исключением несчетного множества точек, которые образуют канторовское множество. Таким образом, щели между ступеньками функции $\theta(P)$ образуют фрактал с нулевой мерой, и увеличение любой части кривой $\theta(P)$ (не внутри ступеньки) будет давать начальную кривую.] Когда $g > g_c$ дьявольская лестница $\theta(P)$ становится неполной, то есть, функция $\theta(P)$ принимает иррациональные значения на множестве значений P имеющем конечную (ненулевую) меру (напомним, что соответствующие орбиты отображения принадлежат к КАМ циклам). Функция $\theta(P)$ остается фиксированной при каждом рациональном значении, но интервалы стационарности (относительно значения P) становятся меньше, так что кривая $\theta(P)$ между ступеньками кажется гладкой. Важным свойством является то, что в любом данном интервале (P_1, P_2) , сумма длин всех ступенек стремится к нулю когда g стремится к бесконечности.

Приведенное выше описание позволяет нам нарисовать нуль-температурную фазовую диаграмму ФК системы на параметрической плоскости (g, P) (см. Рис. 5.12). Конечно, фазовая диаграмма может быть сконструирована только при помощи компьютерного моделирования. Наиболее эффективный метод был предложен Гриффитсом и Чоу [276]. Область занимаемая ОС с данным рациональным значением w проявляется как “язык” в фазовой плоскости. Между этими языками, которые показаны на Рис. 5.12, существует бесконечное число других языков (которые не показаны, большинство из них будут экстремально узкими) для каждого рационального значения w , и они заполняют, до некоторой степени, области между языками явно показанными на рисунке. В дополнении, так как w является непрерывной функцией от P , должны существовать линии соответствующие иррациональным значениям w лежащие между доменами соответствующими рациональным значениям.

В заключение, мы заметим что для строго выпуклого потенциала $V_{\text{int}}(x)$ все переходы между различными структурами являются непрерывными (“второго рода”) как для области полной, так и для неполной дьявольской лестницы, так как здесь все взаимодействия являются отталкивающими (см. ссылки [455]–[457], [460], [501]–[504]).

5.4 Обобщения ФК модели

Для применения модели ФК к реальным физическим системам требуется ее обобщение, так как обычно потенциал подложки не является чисто синусоидальным, а межатомные взаимодействия не являются чисто гармоническими. С общей точки зрения, любое отклонение от точно интегрируемой СГ системы обычно приводит к “увеличению хаоса” в системе, то есть к уменьшению области занимаемой “КАМ торами” (“КАМ циклами” в двухмерном отображении) [см., например, работу Милчева [221], где гармонический потенциал был заменен потенциалом Тоды]. Другими словами, регулярные “КАМ циклы” симплектического отображения начинают разрушаться при низких значениях параметра отображения $K \equiv g^{-1}$. Для соответствующей модели это проявляется в возрастании (а) ПН барьеров, (б) величины $g_{\text{Aubry}}(w)$ и, следовательно, (с) порогового

значения g_c перехода от полной к неполной дьявольской лестнице. Кроме того, отклонение от стандартной модели ФК может приводить к (i) появлению различных фаз с одним и тем же значением параметра соразмерности, (ii) замене непрерывных переходов между фазами дискретными переходами, и (iii) к нарушению кинк-антикинковой симметрии. Ниже мы более детально рассмотрим эти вопросы.

5.4.1 Потенциал подложки общей формы

В общем случае периодический потенциал подложки $V_{\text{sub}}(x)$ может быть разложен в косинус ряд Фурье

$$V_{\text{sub}}(x) = \sum_{p=1}^{\infty} \beta_p [1 - \cos(px)]. \quad (5.115)$$

Далее мы рассматриваем только малые отклонения потенциала от синусоидальной формы, такие что $\beta_1 \simeq 1$ и $|\beta_p| \ll 1$ для $p \geq 2$. Поведение ФК модели в случае $\beta_2 < 0$ отличается от случая $\beta_2 > 0$. Когда $\beta_2 < 0$, $V_{\text{sub}}(x)$ имеет профиль с широкими ямами разделенными узкими барьерами. В этом случае фазовая диаграмма в плоскости (g, P) топологически подобна фазовой диаграмме для стандартной модели ФК, а фазовые переходы происходят на качественном уровне тем же самым способом [445, 505].

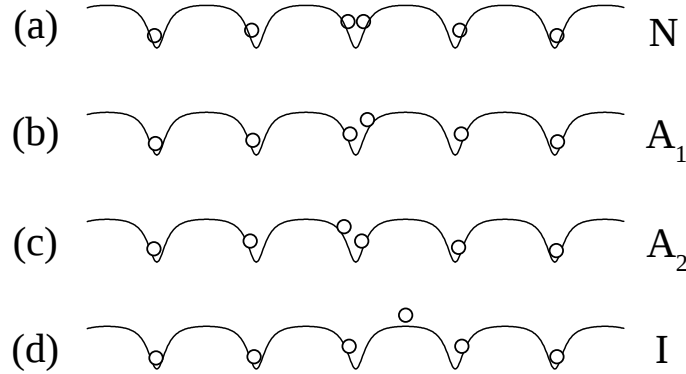


Рис. 5.13. Устойчивые конфигурации кинка для потенциала подложки с узкими ямами разделенными плоскими барьерами. Нормальная конфигурация (a), асимметричные конфигурации (b) и (c), а также взаимообратная конфигурация (d).

Однако, случай с $\beta_2 > 0$, когда $V_{\text{sub}}(x)$ имеет профиль с острыми ямами разделенными плоскими барьерами, является более сложным, так как здесь структура кинка уже зависит от значения модельного параметра g [165, 186]. Напомним, что для стандартной модели ФК единичный кинк имеет только две стационарные конфигурации. Первая из них (устойчивая), показанная на Рис. 5.13(a), описывает конфигурацию в которой два атома занимают ту же самую яму потенциала и расположены симметрично относительно минимума ямы. Она соответствует минимуму ПН потенциала. Во второй (неустойчивой или седловой) конфигурации, показанной на Рис. 5.13(d), дополнительный атом локализован на вершине потенциала $V_{\text{sub}}(x)$. Эта конфигурация соответствует максимуму ПН потенциала $V_{PN}(X)$. Мы будем обозначать описанную ситуацию как N (то есть нормальную) ситуацию. Очевидно, что она всегда имеет место для любого потенциала $V_{\text{sub}}(x)$, по крайней мере в пределе $g \rightarrow 0$. Однако, когда $V_{\text{sub}}(x)$ имеет острые ямы разделенные плоскими барьерами при некотором значении напряженности межатомного потенциала g имеет место I (то есть инверсная) ситуация, в которой конфигурация показанная на Рис. 5.13(a) соответствует максимуму, а конфигурация Рис. 5.13(d) – минимуму ПН потенциалу. При возрастании параметра g N- и I- случаи чередуются друг с другом. В дополнении к этому между N- и I- областями может существовать промежуточные области, где обе конфигурации показанные на Рис. 5.13(a) и Рис. 5.13(d) соответствуют локальным максимумам функции $V_{PN}(X)$, а минимум достигается на некоторой промежуточной асимметричной конфигурации показанной на Рис. 5.13(b) или Рис. 5.13(c) и обозначенные как A_1 или A_2 . Теперь, если мы увеличим несоответствие P за пределы ФвдМ предела P_{FM} (конечно, значение P_{FM} теперь отличается от значения вычисленного для стандартной модели ФК), то ОС системы будет кноидальная волна кинков N-, I-, или A- типов, в зависимости от значения параметра g .

Таким образом, при $\beta_2 > 0$ соразмерное ОС с параметром соразмерности $w = r/s$ может быть одним из следующих типов [466, 478]. Для N-типа ОС существует некоторое целое j такое, что для любого l

$$\begin{aligned} x_{j+l} &= -x_{j-l} \quad \text{если } s \text{ нечетно,} \\ x_{j+l} &= -x_{j+1-l} \quad \text{если } s \text{ четно.} \end{aligned} \quad (5.116)$$

Для нечетного s в минимумах потенциала $V_{\text{sub}}(x)$ будут находиться некоторые атомы, а для четного значения s в минимумах потенциала нет ни одного атома. Мы будем говорить что ОС имеет I-тип если существует некоторое целое j такое, что для любого l

$$x_{j+l} - \frac{1}{2}a_s = \frac{1}{2}a_s - x_{j-l}. \quad (5.117)$$

В конфигурации I-типа имеются некоторые атомы на максимумах потенциала V_{sub} . Обе конфигурации N- и I-типа обладают зеркальной симметрией. Если ОС не удовлетворяет ни уравнению (5.116), ни уравнению (5.117), то мы будем говорить, что она имеет A-тип. Не обладающее симметрией ОС A-типа является дважды вырожденным, так как его можно рассмотреть как состояние сконструированное из кинков типа A_1 или из кинков типа A_2 (основные состояния A_1 и A_2 являются зеркальными отображениями друг друга). Таким образом, ситуация здесь оказывается подобной ситуации для двухъямного потенциала подложки (см. параграф 3.3.4), где также имеются “левые” и “правые” кинки.

Так как при $\beta_2 > 0$ параметр соразмерности w не задает однозначно конфигурацию, то различные типы основных состояний здесь могут быть охарактеризованы, например, координатой центра масс элементарной ячейки, определенной уравнениями (5.33), (5.34), и буквой N, I, A_1 , или A_2 . Фазовая диаграмма ФК цепи со “свободными концами” показана на Рис. 5.14. Здесь языки, соответствующие рациональным значениям числа w , теперь расщепляются множеством горизонтальных полос, на которых происходит фазовый переход между различными фазами с тем же самым значением соразмерности. Число таких горизонтальных полос увеличивается с ростом “порядка” C-фазы s . Заметим, что в цепи с двойным-СГ потенциалом подложки (то есть если $\beta_p = 0$ при $p \geq 3$) отсутствуют асимметрические (A-типа) фазы [445].

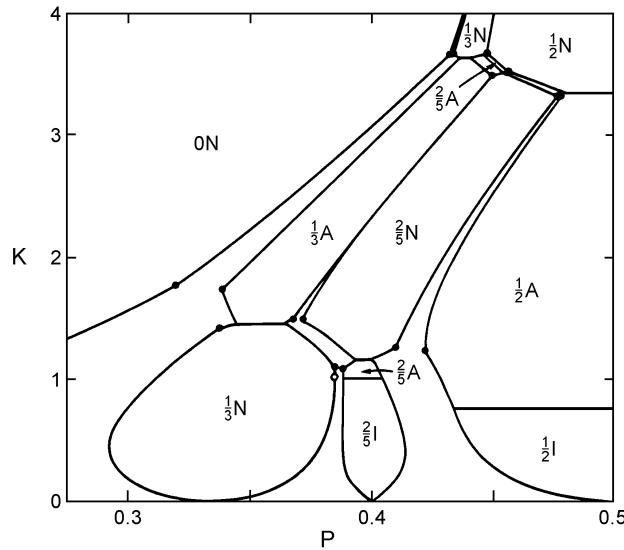


Рис. 5.14. Фазовая диаграмма для гармонически взаимодействующих атомов с $g = K^{-1}$ и несинусоидальным потенциалом подложки с $\beta_1 = 1$, $\beta_2 = 1/4$, $\beta_3 = 1/6$ и $\beta_p = 0$ для $p \geq 4$. Числа соответствуют значениям w , буквы обозначают тип фазы ОС [478].

Переходы между фазами разных типов но с тем же самым значением w являются “фонон-стимулируемыми”: с изменением напряженности g минимальное значение фононной частоты $\omega_{\min}$ обращается в ноль, а соответствующая фаза становится неустойчивой. Эти переходы могут быть непрерывным (“второго рода”) если частота $\omega_{\min}$ непрерывно стремиться к нулю, или они могут дискретными (“первого рода”) когда неустойчивость появляется внезапно. Например, в случае представленном на Рис. 5.14, все переходы между N и A фазами являются дискретными, в то время как переходы между I и A фазами являются непрерывными. Используя соображения симметрии легко догадаться, что если отсутствуют A-фазы (как в модели двойной-СГ), то переходы $N \leftrightarrow I$ будут всегда непрерывными [445]. Переходы между фазами с различными значениями параметров соразмерности являются непрерывными так как они являются “кинк-стимулируемыми” с отталкивающим взаимодействием между кинками. Эти переходы являются аналогичными переходам в стандартной модели ФК. Заметим только, что предельные значения $P_{FM}^{\pm}(w)$ существования A-фазы определяются теперь из уравнения $\varepsilon_k^{(\text{left})} + \varepsilon_k^{(\text{right})} = 0$,

так как для любого асимметричного ОС “левые” и “правые” кинки в силу топологических ограничений должны следовать друг за другом.

Блэк и Сатия [488, 506] детально исследовали цепочка ФК с фиксированной плотностью в случае потенциала подложки двойной-СГ. Они показали, что фазовая диаграмма в плоскости (β_1, β_2) для иррационального значения параметра w является очень сложной и состоит из каскадов переходов типа пининг-депининг (Обри), а граница между двумя фазами имеет фрактальную структуру (см. Рис. 5.15). В дополнении, в пинингованной фазе переход Обри к депинингованной фазе связан с переходом первого рода между двумя конкурирующими (N- и I-) основными состояниями. Это подразумевает существование фрактальной структуры в спектре фононных возбуждений возможных основных состояний. Блэк и Сатия [488] также показали, что фрактальная граница фаз и ее фрактальная структура может быть объяснена простыми правилами сложения.

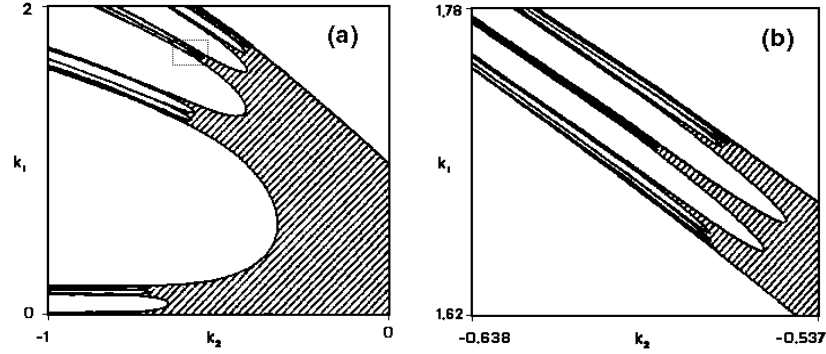


Рис. 5.15. Фазовая диаграмма в плоскости (k_2, k_1) для цепи ФК с фиксированной плотностью и потенциалом подложки двойной-СГ $V_{\text{sub}}(x) = -k_1 \cos x + \frac{1}{4}k_2 \cos 2x$. Параметр $g = 1$, число $w = (\sqrt{5} - 1)/2$. Часть рисунка (b) показывает увеличение малой прямоугольной части рисунка (a). Заштрихованная область соответствует непинингованным конфигурациям [488].

5.4.2 Ангармонический межатомный потенциал

В реальных системах взаимодействие между частицами не является чисто гармоническим. Например, квантово-механические (“химические”) связи атомов или молекул могут быть приблизительно описаны экспоненциальным законом. Такой же закон описывает отталкивание чистых примесных зарядов экранированных электронами подложки (экранирование Дебая). Неэкранированное отталкивание заряженных частиц описывается законом Кулона. Отметим также диполь-дипольное отталкивание атомов адсорбированных химически на поверхности кристалла [36].

В качестве типичного примера ангармонического взаимодействия мы рассмотрим экспоненциальный потенциал Тоды

$$\tilde{V}_{\text{int}}(x) = V_0 \exp \left[-\beta \left(\frac{x}{a_s} - 1 \right) \right], \quad (5.118)$$

где V_0 – энергия взаимодействия двух атомов расположенных в двух ближайших соседних минимумах потенциала подложки, а β – безразмерный параметр ангармоничности. С целью показать роль в фазовой диаграмме ангармоничности взаимодействия мы ограничимся только учетом взаимодействия ближайших соседей.

Для модели ФК с ангармоническим потенциалом основной параметр модели

$$g_x = V_{\text{int}}''(x), \quad (5.119)$$

в отличие от стандартной модели ФК, уже не является постоянным. Это позволяет нам исследовать поведение системы когда концентрация θ является естественной переменной модели. (В стандартной ФК модели предположение $g = \text{Const}$ ограничивает рассмотрение взаимодействия малым интервалом изменения межатомных расстояний.

Для того чтобы рассмотреть ФК цепочку со “свободными концами” мы введем внешнее давление Π , то есть добавим линейную притягивающую ветвь к отталкивающему потенциалу (5.118),

$$V_{\text{int}}(x) = \tilde{V}_{\text{int}}(x) + x(\Pi - \Pi_0), \quad (5.120)$$

где значение Π_0 выбирается таким образом, что при $\Pi = 0$ потенциал $V_{\text{int}}(x)$ имел минимум при $x = a_s$. Уравнение (5.120) можно переписать в форме

$$V_{\text{int}}(x) = \tilde{V}_{\text{int}}(x) - x \tilde{V}'_{\text{int}}(a_{\text{min}}), \quad (5.121)$$

так что со модифицированный межатомный потенциал имеет свой минимум при $x = a_{\text{min}}$. Заметим, что для цепочки с “фиксированной плотностью” такая модификация невозможна.

Как и для стандартной модели ФК, стационарные конфигурации ангармонической модели могут быть получены как орбиты сохраняющего площадь отображения [221]

$$\begin{cases} \tilde{x}_{l+1} = \tilde{x}_l + \tilde{p}_l, \\ \exp(-\beta \tilde{p}_{l+1}/a_s) = \exp(-\beta \tilde{p}_l/a_s) - (a_s/\beta V_0) \sin \tilde{x}_l. \end{cases} \quad (5.122)$$

Присутствие ангармоничности приводит к глубокому изменению отображения, оно становится асимметричным относительно знака $\tilde{p}$ (сравните Рис. 5.2 и 5.16). Для $\tilde{p} < 0$ (то есть, для конфигурации соответствующей $a_A < a_s$) орбиты в плоскости $(\tilde{x}, \tilde{p})$ являются значительно меньше модулированными из-за отталкивания потенциала Тоды (5.118) при $x \rightarrow 0$. С другой стороны, для $\tilde{p} > 0$ ($a_A > a_s$) большинство орбит оказываются разрывными, что показывает разрушение системной целостности (разрушение КАМ циклов) из-за ослабления сил взаимодействия с увеличением межатомных расстояний. Так, при фиксированных значениях V_0 и β , скользящие основные состояния существуют только для достаточно больших иррациональных значений θ , в то время как для малых значений θ все несоизмеримы фазы являются закрепленными. Однако, переход разрушения аналитичности (переход Обри) происходит аналогично переходу в стандартной модели ФК [266]. В частности, Лин и Ху [467] показали, что критические индексы в уравнении (5.81) не зависят от параметра ангармоничности и равны их значениям в стандартной модели ФК.

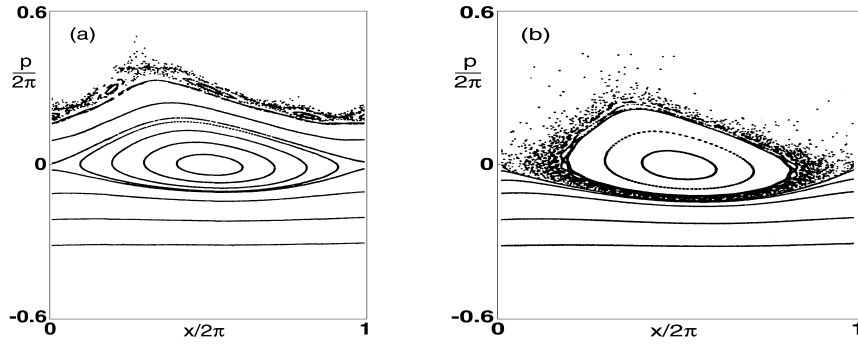


Рис. 5.16. Орбиты отображения (5.19) для $\beta = 4\pi$ и (a) $V_0 = 1.260$, (b) $V_0 = 1.031$ [221].

Наиболее важным результатом ангармоничности является нарушение кинк-антикинкковой симметрии стандартной ФК модели. Первыми этот результат численно получили Милчев и Марков [262],[507]–[509]. Действительно, эффективные силы взаимодействия в кинке (в области локального сжатия) превышают силы в антикинке (в области локального растяжения атомной цепи). В результате этого, при тех же самых значениях параметров V_0 и β кинк по сравнению с антикинком характеризуется большим значением энергии рождения и меньшими значениями эффективной массы и ПН потенциального барьера [165]. Аналитически этот эффект можно описать следующим способом. Давайте рассмотрим кинк с топологическим зарядом $\sigma = \pm 1$ для тривиального фонового ОС с $\theta = 1/q$, где q – целое. В пределе слабого взаимодействия $V_0 \rightarrow 0$, используя подход параграфа 5.2.1, энергию кинка можно представить в виде

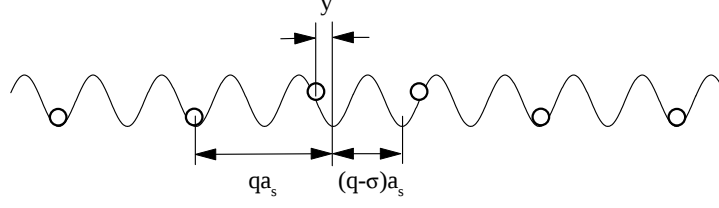
$$\varepsilon_k^\sigma \simeq y^2 + 2V_{\text{int}}(qa_s - \sigma y) + V_{\text{int}}(qa_s - \sigma a_s + 2\sigma y) - 3V_{\text{int}}(qa_s), \quad (5.123)$$

где y – амплитуда смещений двух атомов расположенных у центра кинка (см. Рис. 5.17). Раскладывая функции V_{int} по малому y и минимизируя затем ε_k^σ по y , мы получим

$$\varepsilon_k^\sigma \simeq [V_{\text{int}}(qa_s - \sigma a_s) - V_{\text{int}}(qa_s)] - \frac{[V'_{\text{int}}(qa_s - \sigma a_s) - V'_{\text{int}}(qa_s)]^2}{[1 + V''_{\text{int}}(qa_s) + 2V''_{\text{int}}(qa_s - \sigma a_s)]}.$$

Аналогично мы можем вычислить другие независимые от Π параметры, такие как энергия рождения кинк-антикинкковой пары $\varepsilon_{\text{pair}} = \varepsilon_k^{(\sigma=+1)} + \varepsilon_k^{(\sigma=-1)}$, и амплитуду ПН барьеров ε_{PN}^σ .

В противоположном случае сильного межатомного взаимодействия, $V_0 \rightarrow \infty$, мы можем использовать континуальное приближение параграфа 5.2.1. (Напомним однако, что если параметр ангармоничности β превышает некоторое критическое значение β_{crit} , континуальное приближение становится невозможным даже в пределе

Рис. 5.17. Структура кинка при $V_0 \rightarrow 0$.

$V_0 \rightarrow \infty$ – см. параграф 3.5.1 и ссылку [266]). В этом случае уравнение движения системы сводиться к форме [165, 264]

$$\frac{d^2 u}{d\tilde{x}^2} \left(1 - \alpha \frac{du}{d\tilde{x}} \right) = \sin u, \quad (5.124)$$

где

$$\alpha = - \frac{V_{\text{int}}'''(qa_s)}{[V_{\text{int}}''(qa_s)]^{3/2}}. \quad (5.125)$$

Из уравнения (5.124) следует, что ширина кинка теперь зависит от его топологического заряда

$$d \rightarrow d_{\text{eff}}^\sigma = d \left(1 - \frac{\pi}{3} \sigma \alpha \right), \quad (5.126)$$

а энергия рождения кинка равна

$$\varepsilon_k^\sigma = -\sigma a_s V_{\text{int}}'(qa_s) + E_k^\sigma, \quad (5.127)$$

где независимый от Π вклад E_k^σ также зависит от σ ,

$$E_k^\sigma = 4\varepsilon_s \sqrt{g_a} \left(1 + \frac{1}{12} \sigma \alpha \right), \quad g_a = V_{\text{int}}''(qa_s). \quad (5.128)$$

Аналогично можно посчитать эффективную массу кинка

$$m^\sigma = m \left(1 - \frac{\pi}{6} \sigma \alpha \right), \quad (5.129)$$

и амплитуду ПН потенциала

$$\varepsilon_{PN}^\sigma \simeq \varepsilon_{PN}(g_a) + \sigma \left(\frac{d\varepsilon_{PN}(g)}{dg} \right)_{g=g_a} \Delta g, \quad (5.130)$$

где функция $\varepsilon_{PN}(g)$ задается уравнением (5.58), а $\Delta g = (2\pi/3)\alpha g_a$.

Приведенные выше формулы позволяют нам найти параметры кинка как функции концентрации θ во всем интервале значений $0 \leq \theta < \infty$, что очень важно для исследования переноса масс в ФК цепи с “фиксированной плотностью” (см. далее параграфы 7.4). Ясно, что такие функции $\varphi(\theta)$ (где φ есть или m или ε_{PN}) определяют счетное множество рациональных чисел θ (так как кинки можно ввести только для С-фаз), беря при каждом рациональном θ два значения, левое $\varphi(\theta - 0) \equiv \varphi^{(\sigma=-1)}(\theta)$ и правое $\varphi(\theta + 0) = \varphi^{(\sigma=+1)}(\theta)$. Однако, для концентраций из интервала $0 \leq \theta < \theta_{\text{Aubry}}$, где иррациональное значение θ_{Aubry} вводится как наименьшее удовлетворяющее неравенству $V_{\text{int}}''(a_s/\theta_{\text{Aubry}}) > g_{\text{Aubry}}(\theta_{\text{Aubry}})$, функции $m(\theta)$ и $\varepsilon_{PN}(\theta)$ можно сделать непрерывными если рассмотреть несоизмеримое основное состояние как предел С-фаз с возрастающим периодом. Обе функции $m(\theta)$ и $\varepsilon_{PN}(\theta)$ монотонно уменьшаются от значений $m(0) = m_a$ и $\varepsilon_{PN}(0) = \varepsilon_s$ к нулю при изменении θ от 0 до ∞ и, как было описано выше, они совершают прыжки амплитуды

$$\Delta\varphi(\theta) = \varphi(\theta - 0) - \varphi(\theta + 0) \quad (5.131)$$

на каждом рациональном θ , так что их графики выглядят подобно обратной дьявольской лестнице (см. Рис. 5.18). Наибольший прыжок происходит для С-структуры с концентрацией θ близкой к θ^* , где θ^* определяется из уравнения $V_{\text{int}}''(a_s/\theta^*) = 1$. Кроме того, для двух фоновых структур с близко расположенными концентрациями, наименьший скачок показывает фазу с наиболее упорядоченной структурой, то есть фазу с большим периодом a . Такое поведение происходит из-за того, что за скачок более ответственным является взаимодействие между смежными элементарными ячейками, чем взаимодействие между атомами ячейки, так как расщепление антикинковых и кинковых параметров определяется ангармоничностью взаимодействия на расстоянии $x = a$, в силу этого ангармоничность обычно уменьшается с возрастанием порядка структуры.

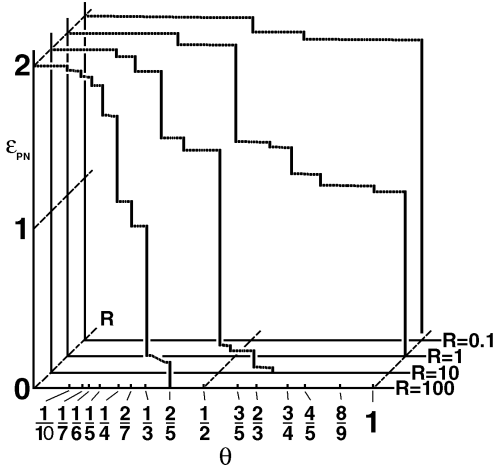


Рис. 5.18. Амплитуда ПН потенциала ε_{PN} как функция от θ для диполь-дипольного отталкивания $V_{\text{int}}(x) = V_0 (a_s/x)^3$ при $R = 0.1, 1, 10$, и 100 , где $R = V_0/\varepsilon_s$ [165].

Поведение функции $\varepsilon_{\text{pair}}(\theta)$ является более нерегулярным. Так как энергия рождения кинк-антикинк-пары тоже определяется взаимодействием ближайших соседних элементарных ячеек, а не атомов, то энергия $\varepsilon_{\text{pair}}$ принимает большие значения для простых структур и меньшие значения для более упорядоченных структур. Однако, $\varepsilon_{\text{pair}}(\theta)$ “в среднем” возрастает с ростом θ из-за увеличения параметра $g_{a_A} = V_{\text{int}}'(a_A)$ с уменьшением межатомного расстояния $a_A = a_s/\theta$.

Для ФК цепи со “свободными концами” уравнения (5.120), (5.121), (5.127), (5.128) помогают сконструировать общую фазовую диаграмму системы. Так как потенциал Тоды (5.118) является строго выпуклой функцией, то эта диаграмма должна быть топологически подобной диаграмме стандартной ФК модели (сравните рисунки 5.19 и 5.12). Кроме того, из-за асимметрии ангармонических потенциалов фазовую диаграмму нужно строить для полного интервала. Например, давайте рассмотрим границы Франка ван дер Мерве (ФвдМ), которые отделяют тривиальное ОС с $\theta = 1/q$ от основных состояний с формой кноидальной волны. Эта граница определяется уравнением $\varepsilon_k^\sigma = 0$. В пределе слабой связи, $V_0 \rightarrow 0$, мы получим соотношение

$$\sigma a_s \tilde{V}'_{\text{int}}(a_{\min}) = \Delta \tilde{V}_{\text{int}}(qa_s) + \frac{[\Delta \tilde{V}'_{\text{int}}(qa_s)]^2}{[1 + \tilde{V}_{\text{int}}''(qa_s) + 2\tilde{V}_{\text{int}}''(qa_s - \sigma a_s)]}, \quad (5.132)$$

где

$$\Delta \tilde{V}_{\text{int}}(qa_s) = [\tilde{V}_{\text{int}}(qa_s) - \tilde{V}_{\text{int}}(qa_s - \sigma a_s)],$$

Таким образом, для потенциала Тоды (5.118) ФвдМ кривые описываются уравнением

$$\frac{a_{\min}}{a_s} \simeq \left(q - \frac{1}{2}\sigma\right) - \psi(\beta) + \sigma \left(\frac{V_0 \beta^2}{a_s^2}\right) \left(\frac{e^\beta - 1}{\beta}\right) \exp \left[\beta \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sigma - q\right)\right], \quad (5.133)$$

где сдвиг ФвдМ границ из-за ангармоничности равен

$$\psi(\beta) = \frac{1}{2} + \frac{1}{\beta} \ln \frac{(1 - e^{-\beta})}{\beta} \simeq \begin{cases} \beta/24 & \text{если } \beta \rightarrow 0, \\ \frac{1}{2} - \frac{1}{\beta} \ln \beta & \text{если } \beta \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (5.134)$$

Аналогично, в пределе сильного взаимодействия, $V_0 \rightarrow \infty$, уравнение $\varepsilon_k^\sigma = 0$ вместе с уравнениями (5.121), (5.125), (5.127), (5.128) приводят к соотношению

$$a_s \tilde{V}'_{\text{int}}(a_{\min}) \simeq a_s \tilde{V}'_{\text{int}}(qa_s) - 8\sqrt{g_a}(\sigma + \alpha/12). \quad (5.135)$$

Таким образом, для потенциала Тоды (5.118) мы получаем уравнение

$$a_{\min} \approx qa_s - \frac{8}{\beta} e^{\beta(q-1)/2} \left[\sigma \sqrt{K} - \left(\frac{2}{\pi} - \frac{1}{12}\right) e^{\beta(q-1)/2} K \right], \quad (5.136)$$

где $K = 1/V_0$. Результирующая фазовая диаграмма показана на рис. 5.19.

Для потенциала Тоды ФвдМ границы были вычислены Милчевым и Марковым [262],[507]–[509], а также by Buge and Miller [279]. Кроме того, Лин и Ху [467] вычислили фазовую диаграмму ФК системы с потенциалом Тоды и изучили мульти-фрактальные свойства дьявольской лестницы.

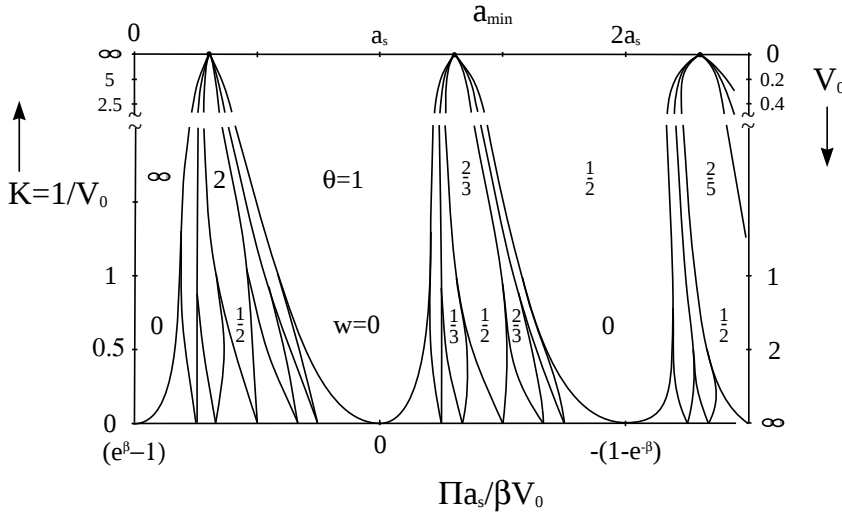


Рис. 5.19. Схематическое представление общих фазовых диаграмм для ангармонической ФК модели с межатомным потенциалом Тоды. Соразмерные фазы пронумерованы значениями концентрации $\theta = s/q$ и параметром соразмерности $w = \{q/s\}$. Верхняя горизонтальная ось является линейной относительно $a_{\min}$, для удобства также приведено “давление” Π (заметим что Π -шкала нелинейна), которое связано с $a_{\min}$ соотношением $\Pi a_s / \beta V_0 = \exp[\beta(1 - a_{\min}/a_s)] - 1$. Левая вертикальная ось соответствует $K = V_0^{-1}$, а правая ось показывает V_0 . Заметим также что нижняя часть левой оси является линейной относительно K , а верхняя часть правой оси линейна относительно V_0 .

5.4.3 Невыпуклое взаимодействие

Если реальное физическое взаимодействие имеет отталкивающую ветвь, то потенциал взаимодействия как правило не является строго выпуклым. Как типичные примеры мы можем упомянуть двухъямный потенциал (ϕ^4) исследованный Обри с соавторами [510], Марчандом с соавторами [286], Бирне и Миллером [279], потенциал Леннарда-Джонса [279, 511], потенциал Морса [512, 513] и осциллирующий потенциал [282]. Все эти потенциалы имеют одну или более точек перегиба, определяемые из уравнения

$$V''_{\text{int}}(a_{\text{inf}}) = 0. \quad (5.137)$$

Таким образом, теперь мы встретимся с моделью имеющей три (или более) конкурирующие длины a_s , $a_{\min}$ и a_{inf} , поэтому любое аналитическое исследование этой задачи становится очень сложным. Однако, компьютерное моделирование делает возможным понять основные аспекты поведения ФК модели с невыпуклыми взаимодействиями. А именно, полезно сделать различие между “выпуклыми” ФК конфигурациями, которые используют только выпуклую часть потенциала $V_{\text{int}}(x)$, от “невыпуклых” конфигураций, которые используют вогнутую часть $V_{\text{int}}(x)$ по крайней мере однажды на периоде С-фазы. В “выпуклой” области фазовой плоскости (то есть, в области занятой только выпуклыми конфигурациями) параметр соразмерности однозначно определяет фазу, а переходы между этими фазами проявляются в описанном выше поведении дьявольской лестницы.

Для невыпуклых конфигураций параметр $g_l = V''_{\text{int}}(x_{l+1} - x_l)$ становится отрицательным по крайней мере для некоторых пар ближайших соседних атомов и ясно что это радикально изменяет поведение системы, приводя к двум новым аспектам. *Первое*, теперь параметр w (или концентрация) не определяет однозначно структуру из-за появления модулированных (полимеризованных) структур, которые, например, состоят из чередования коротких (“сильных”) и длинных (“слабых”) связей. Причина таких искажений — уменьшение энергии искаженного ОС относительно от энергии неискаженного ОС. Переходы между этими структурами стимулируются фононами и обычно (но не всегда) непрерывными. Эти вопросы уже были рассмотрены в параграфе 3.5.2 для ФК цепи с “фиксированной плотностью” при $\theta = 1$. *Вторым* важным аспектом является то, что для невыпуклых фоновых С-конфигураций кинк-кинковое взаимодействие может быть (и очень часто является) притягивающим по крайней мере на некотором расстоянии R^* . Теперь, если мы рассмотрим некоторое “возбужденное состояние” такой конфигурации как состоящее из последовательности кинков отделенных друг от друга на расстояние R^* , избыток энергии на один кинк может быть записан в форме $\Delta\epsilon = \epsilon_k + v_{\text{int}}(R^*)$. Тогда, если энергия взаимодействия между кинками становится отрицательной для некоторого пространственного размещения последовательности, $v_{\text{int}}(R^*) < 0$, условие $\Delta\epsilon \leq 0$ может выполняться даже при положительности энергии рождения кинка, $\epsilon_k > 0$. Следовательно, с изменением модельных параметров, таких как $a_{\min}$ или Π , переход между двумя фазами с различными параметрами соразмерности будет разрывным (переходом первого рода), и новая фаза будет появляться внезапно с конечным скачком плотности кинков. Ниже мы рассмотрим в деталях два важных примера невыпуклых потенциалов — потенциал Морса и осциллирующий потенциал.

Потенциал Морса, показанный на рис. 5.20, является одним из наиболее важных для реальных систем. Он задается функцией

$$V_{\text{int}}(x) = V_{\min}(e^{-2Z} - 2e^{-Z}), \quad (5.138)$$

где

$$Z = \kappa \left(\frac{x}{a_{\min}} - 1 \right).$$

Функция (5.138) имеет минимум при $x = a_{\min}$, $V_{\text{int}}(a_{\min}) = -V_{\min}$, и стремится к нулю (как и должно быть для реалистических межатомных потенциалов) с увеличением расстояния x . Этот потенциал описывает, например, “прямое” взаимодействие между атомами или молекулами, химически адсорбированных на поверхностях кристаллов [36]. (Отметим, что в физически адсорбированном разреженном газе атомов межатомное взаимодействие описывается потенциалом Леннарда-Джонса $V_{\text{int}}(x) = V_{\min} \left[(a_{\min}/x)^{12} - 2(a_{\min}/x)^6 \right]$, который качественно подобен потенциалу Морса). Потенциал Морса имеет точку перегиба при

$$a_{\text{inf}} = a_{\min} (1 + \kappa^{-1} \ln 2), \quad (5.139)$$

в дали от которой (при $a_{\text{inf}} < x < \infty$) потенциал является вогнутой функцией, $V_{\text{int}}''(x) < 0$. Вблизи минимума потенциал Морса является практически гармоническим

$$V_{\text{int}}(x) \simeq -V_{\min} + \frac{g}{2}(x - a_{\min})^2, \quad g = 2V_{\min}(\kappa/a_{\min})^2. \quad (5.140)$$

Раскладывая притягивающую ветвь потенциала Морса [то есть, второй член в правой части уравнения (5.138)] в ряд Тейлора до линейного члена мы получим потенциал Тоды

$$V_{\text{int}}^{(\text{Toda})}(x) = V_0 \left\{ \exp \left[-\beta \left(\frac{x}{a_s} - 1 \right) \right] + x \frac{\beta}{a_s} \exp(-\beta P_1) + C \right\} \quad (5.141)$$

с параметрами

$$V_0 = V_{\min} \exp(\beta P_1), \quad (5.142)$$

$$\beta = \sqrt{2}\kappa/(1 + P_1), \quad (5.143)$$

и

$$C = -(2 + \beta a_{\min}/a_s) \exp(-\beta P_1), \quad (5.144)$$

где $P_1 = (a_{\min} - a_s)/a_s$ естественным несоответствием. Оба потенциала (5.138) и (5.141) имеют ту же самое гармоническое приближение (5.140) и одинаковые отталкивающие ветви, в то время как их притягивающие ветви (так же как и третьи и четвертые производные) различны. Сравнивая поведение ФК цепей с потенциалом Морса и Тоды помогает различить ангармонические эффекты от эффектов невыпуклости [512]. А именно, Морса ФК модель демонстрирует два явления которые отсутствуют в ФК модели Тоды: существование модулированных конфигураций и возможность разрыва цепи в ядре антикинка в случае отрицательного значения параметра несоответствия.

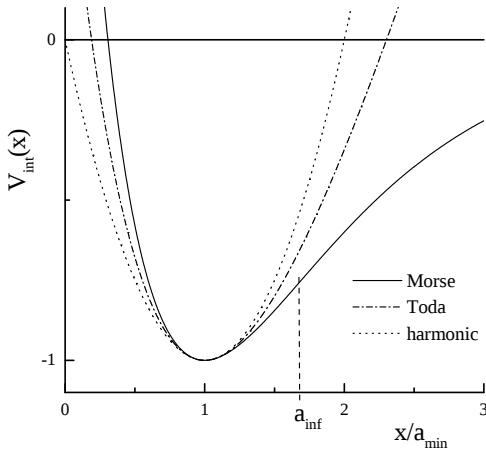


Рис. 5.20. Потенциал Морса (сплошная кривая), его гармоническое приближение (штриховая кривая) и потенциал Тоды (штрихпунктирная кривая).

Как и ранее давайте начнем с ФК модели с “фиксированной плотностью”. Вспомним что гармоническая ФК цепь характеризуется двумя модельными параметрами, концентрацией θ (или межатомное расстояние $a_A = a_s/\theta$) и постоянной упругости g . Ангармоническая (например, тодовская) ФК модель имеет три параметра: θ , энергия взаимодействия V_0 и, дополнительно, параметр β который характеризует ангармоничность и приводит к расщеплению кинк-антикинковых характеристик. Морса ФК цепь имеет четыре модельных параметра: θ , $V_{\min}$

(этот параметр играет роль интенсивности взаимодействия), κ (описывает ангармоничность), и $a_{\min}$ [или, более строго, $a_{\inf}$ связано с $a_{\min}$ в силу уравнения (5.139)], который теперь явно входит в уравнения движения. Именно четвертый параметр делает поведение системы более богатым и сложным.

Вопервых, невыпуклые ФК конфигурации могут быть разрушены или промодулированы. В частности, тривиальная конфигурация с концентрацией $\theta = 1/q$ и средним межатомным расстоянием $a = qa_s$ является невыпуклым если $a \leq a_{\inf}$, или если параметр несоответствия P_q , определенный из уравнения (5.4) как

$$P_q = (a_{\min} - qa_s)/a_s, \quad (5.145)$$

меньше чем критическое значение $P_{\inf}^{(q)}$,

$$P_{\inf}^{(q)} = -\frac{q}{(1 + \kappa/\ln 2)}, \quad (5.146)$$

последнее выражение было получено с помощью уравнений (5.139) и (5.145) где мы положили $a_{\inf} = qa_s$ [512]. Тривиальное ОС будет димеризованным (так что имеет место чередование связей короткая–длинная) если

$$V_{\text{int}}''(a) \leq -1/4. \quad (5.147)$$

Подстановка уравнения (5.138) в (5.147) приводит к уравнению

$$4gz(1 - 2z) = 1, \quad z \equiv \exp \left[-\kappa \left(\frac{qa_s}{a_{\min}} - 1 \right) \right], \quad (5.148)$$

так что кривая разделяющая недеформированные ОС от димеризованных в плоскости $(a_{\min}, V_{\min})$ задается уравнением

$$a_{\min} \left[\left(1 + \frac{\ln 4}{\kappa} \right) - \frac{1}{\kappa} \ln \left(1 + \sqrt{1 - a_{\min}^2 / \kappa^2 V_{\min}} \right) \right] = qa_s. \quad (5.149)$$

Аналогично мы можем определить кривые отделяющие тримерные, тетрамерные и т.д. основные состояния. Они были вычислены Марковым и Траяновым [512] и показаны на рис. 5.21. Как замечено, они начинаются с $P_q = P_{\inf}^{(q)}$. Кроме того, при $V_{\min} < V_{\min}^{(\text{crit})} \equiv (qa_s/\kappa)^2$ нет ни каких искажений независимо от значения P_q , так как слабое взаимодействие способствует неискаженной структуре.

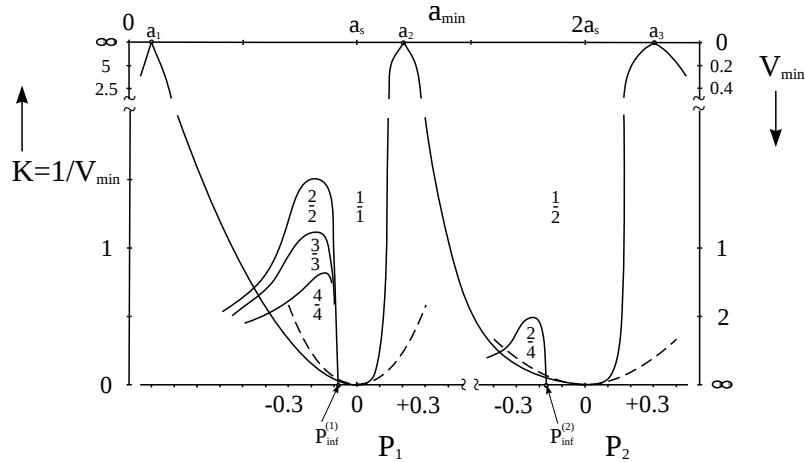


Рис. 5.21. Фазовая диаграмма Морса-ФК системы при фиксированном значении κ (схематично). Соразмерные ОС фазы обозначены значениями концентрации θ . Для того чтобы различить недеформированное ОС от димеризованного мы обозначили первое состояние через $\theta = \frac{1}{1}$ или $\theta = \frac{1}{2}$, а димеризованное ОС через $\theta = \frac{2}{2}$ или $\theta = \frac{2}{4}$, etc. [512].

Вторым важным свойством цепи Морсе-ФК с “фиксированной-плотностью” является то, что она не может существовать если концентрация θ меньше критического значения $\theta^{(\text{crit})}$, или если среднее межатомное расстояние a_A превышает критическое значение $a_A^{(\text{crit})} = a_s/\theta^{(\text{crit})}$. Для того чтобы показать это, давайте рассмотрим изолированную цепочку Морса (то есть цепь без потенциала подложки) и приложим внешнее давление Π , так что потенциал $V_{\text{int}}(x)$ замениться на

$$V_{\text{int}}^{(\Pi)}(x) = V_{\text{int}}(x) + \Pi x. \quad (5.150)$$

Эта цепочка может существовать в сжатом состоянии ($a_A < a_{\min}$) при $\Pi > 0$, в то время как растянутые ОС (с $a_A > a_{\min}$) запрещены. Действительно, при любом отрицательном давлении $\Pi < 0$ потенциал $V_{\text{int}}^{(\Pi)}(x) \rightarrow -\infty$ при

$x \rightarrow \infty$. В результате этого растянутая конфигурация не соответствует абсолютному минимуму потенциальной энергии. (Однако, при достаточно слабой силе растяжения растянутые конфигурации могут существовать как метастабильные состояния). Таким образом, при любом $\Pi < 0$ изолированная цепочка Морса разрывается на независимые полубесконечные цепи со свободными концами, при этом каждая из этих подцепей переходит в ОС с $a_A = a_{\min}$.

Возвращаясь к цепи расположенной на потенциале подложки, легко догадаться, что теперь Морсе-ФК цепь может уже существовать в растянутом состоянии, но только если растяжение не превышает критического значения, $a_A < a_A^{(\text{crit})}$, при $a_A > a_A^{(\text{crit})}$ Морсе-ФК цепь будет разрываться. Для того чтобы найти значение $a_A^{(\text{crit})}$, мы вначале рассмотрим тривиальную конфигурацию с $\theta = 1$ (или $a_A = a_s$). Ясно, что эта конфигурация может существовать в сжатом состоянии при любом значении $a_{\min}$ которое превышает $a_A \equiv a_s$, так как атомы взаимодействуют через выпуклую ветвь потенциала Морса. Теперь, давайте уменьшим $a_{\min}$ ниже значения $a_A \equiv a_s$ полученного расширенной цепи. Когда $a_{\min}$ достигает значения a_{FM}^- которое соответствует левому ФвдМ границе,

$$(a_{FM}^- - a_s)/a_s = P_{FM}^- = -|P_{FM}^-|, \quad (5.151)$$

энергия создания кинка для конфигурации $\theta = 1$ становится равной нулю. Так, при $a_{\min} = a_{FM}^- - \delta$ (где $\delta = +0$) ввод кинков в цепь будет уменьшать энергию системы. Однако, в ФК цепи с “фиксированной плотностью” создание кинков того же самого топологического заряда $\sigma = +1$ запрещено в силу топологического ограничения и кинки могут возникать только в виде кинк-антикинковых пар. Тем не менее, давайте создадим N_p кинк-антикинковых пар и распределим кинки равномерно по цепочке, создав таким образом один большой кластер содержащий N_p антикинков. Распределенные по цепи кинки будут понижать энергию системы линейно пропорционально N_p из-за отрицательности энергии создания кинка, в то время как энергия кластера антикинков, E_{cluster} , будет возрастать с ростом N_p . Для любого выпуклого межатомного потенциала эти процессы являются энергетически невыгодными так как $E_{\text{cluster}} \propto N_p^2$ [например, для стандартной ФК модели $E_{\text{cluster}}(N_p) \approx \frac{1}{2}g(N_p a_s)^2$]. Но для потенциала Морса энергия кластера $E_{\text{cluster}}(N_p) \approx V_{\text{int}}(N_p a_s) - V_{\text{int}}(a_{\min})$ стремится к конечному значению ($\approx V_{\min}$), которое не зависит от N_p при $N_p \rightarrow \infty$. Таким образом, описанные процессы будут энергетически выгодными при $N_p \rightarrow \infty$, и бесконечный кластер вакансий будут расти в одном месте цепочки. Это означает что одна из растянутых связей разрывается и цепочка разламывается на две части. Так, при $a_{\min} = a_{FM}^- - \delta$ цепь с $\theta \leq 1$ не может существовать как ОС, так как она всегда будет разорвана. (Заметим, однако, что состояние $\theta = 1$ может еще существовать как метастабильное состояние с дальнейшим уменьшением $a_{\min}$ до метастабильного предела a_{ms}^-). Далее, давайте возьмем $a_{\min}$ в интервале $a_{FM}^- < a_{\min} < a_{FM}^+$ и попытаемся сконструировать конфигурацию цепи с $\theta = 1 - \delta$. Это состояние может быть рассмотрено как кноидальная волна антикинков. Но теперь все антикинки снова будут сходиться вместе и образовывать один бесконечный кластер (то есть разрыв), так как при $a_{FM}^- < a_{\min} < a_{FM}^+$ конфигурация без антикинков имеет меньшую энергию чем кноидально-волновое состояние, в то время как энергия разрыва конечна. Таким образом, в общем случае значение $a_A^{(\text{crit})}$ совпадает со значением $a_A^{(\text{free})}$ которое равно среднему значению межатомного расстояния в ФК цепи со “свободными концами” с теми же модельными параметрами $V_{\min}$, κ и $a_{\min}$.

Мы должны подчеркнуть, что для бесконечной ФК цепи ее разрыв возможен только для цепочки с “фиксированной плотностью” и только для невыпуклого потенциала $V_{\text{int}}(x)$, который стремится к конечному значению при $x \rightarrow \infty$. Цепочка ФК со “свободными концами” никогда не будет разрываться, так как она вместо этого может сдвинуть свой конец для образования кинков и уменьшения энергии системы используя притягивающую ветвь потенциала $V_{\text{int}}(x)$. Заметим также, что Тода-ФК цепь, в которой $E_{\text{cluster}}(N_p) \propto N_p$, может быть разорвана, но только для больших значений ее растяжения.

Теперь давайте рассмотрим кинковые возбуждения в Морсе-ФК модели. Если тривиальное ОС с $\theta = 1/q$ является недеформированным, то мы можем использовать описанные выше приближения. В частности, в континуальном приближении ($V_{\min} \gg 1$) энергия создания одного кинка с топологическим зарядом σ равна [см. уравнения (5.125), (5.128), (5.130), (5.138), (5.148)]

$$\begin{aligned} \varepsilon_k^\sigma \simeq & \left(\frac{8\kappa}{a_{\min}} \sqrt{2V_{\min}} \right) \left\{ 1 + \left(\sqrt{z(2z-1)} - 1 \right) \right. \\ & \left. + \sigma \left[\frac{\pi}{2\sqrt{2}} \sqrt{V_{\min} z(z-1)} + \frac{1}{4\sqrt{2V_{\min}}} \frac{(4z-1)}{3(2z-1)} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (5.152)$$

где

$$z = \exp[\kappa/(1 + q/P_q)], \quad (5.153)$$

а P_q определяется из уравнения (5.145). Зависимости ε_k^σ от P_q показаны на рис. 5.22. Видно, что энергия создания антикинка в сжатой цепи ($P_q > 0$) всегда меньше энергии создания кинка в растянутой цепи ($P_q < 0$) при том же самом абсолютном значении несоответствия. Для малых значений несоответствия, если $|t| \ll 1$, где $t \equiv \kappa P_q/q$, уравнения (5.152) и (5.153) приводят к

$$\varepsilon_k^\sigma \simeq \left(\frac{8\kappa}{a_{\min}} \sqrt{2V_{\min}} \right) \left\{ 1 + \sigma \left(\frac{\pi}{2\sqrt{2}} \right) \sqrt{V_{\min}} \left(1 + \frac{3}{2}t \right) + \frac{3}{2}t \left(1 + \frac{5}{12}t \right) + \sigma \frac{1}{4\sqrt{2V_{\min}}} \left(1 - \frac{2}{3}t + t^2 \right) \right\}. \quad (5.154)$$

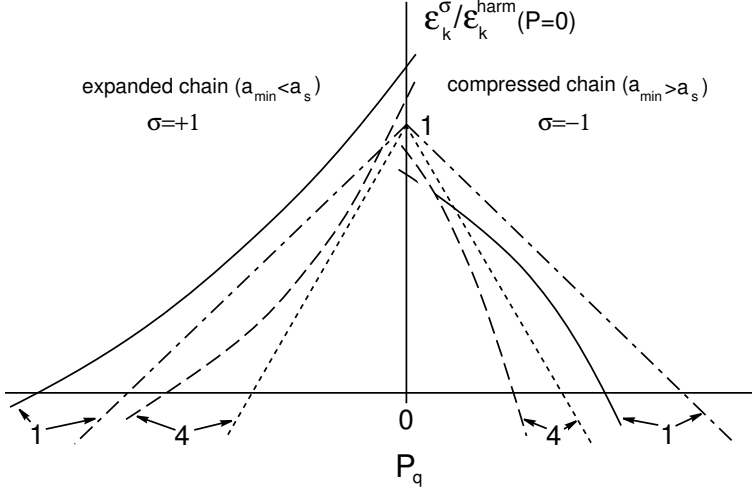


Рис. 5.22. Зависимость энергии создания кинка ($\sigma = +1$) и антикинка ($\sigma = -1$) ε_k^σ (нормализованной относительно значения в гармоническом пределе при $P = 0$) от несоответствия P при фиксированном κ для Морсе-ФК цепи (схематически). Кривые пересекают ось абсцисс при ФвдМ предельных значениях $P_{FM}^\pm$. Сплошные кривые — $V_{\min} = 1$, а пунктирные — $V_{\min} = 4$. Штрих-пунктирные и точечные линии показывают зависимости для соответствующих гармонических пределов [513].

Теперь мы имеем возможность построить фазовую диаграмму для Морса ФК цепи со “свободными концами” без внешнего давления P . Заметим, что этот случай является более простым чем рассмотренный ранее случай “фиксированной плотности”, так как цепочка со “свободными концами” характеризуется только тремя параметрами ($V_{\min}$, κ и $a_{\min}$). В приближении слабой связи, $V_{\min} \rightarrow 0$, ФвдМ пределы существования тривиального ОС с $\theta = 1/q$ определяется уравнением (5.132),

$$V_{\text{int}}(qa_s - \sigma a_s) - V_{\text{int}}(qa_s) = [V'_{\text{int}}(qa_s - \sigma a_s) - V'_{\text{int}}(qa_s)]^2, \quad (5.155)$$

где нужно взять $\sigma = +1$ для получения левой границы, и $\sigma = -1$ для правой границы. Из уравнения (5.155) следует, что при $V_{\min} \rightarrow 0$ основные состояния с $\theta = 1/(q-1)$ и $\theta = 1/q$ отделены точкой на которой

$$a_{\min} = a_q \equiv -\kappa a_s / \ln z_q, \quad (5.156)$$

где z_q — решение уравнения

$$z^{q-1}(z+1) = 2e^{-\kappa}. \quad (5.157)$$

Таким образом, левая граница фазы $\theta = 1$ определяется уравнением

$$a_1 = -\frac{\kappa a_s}{\ln(2e^{-\kappa} - 1)} \simeq \begin{cases} \frac{1}{2}a_s(1 - \frac{1}{2}\kappa) & \text{if } \kappa \ll 1, \\ -\kappa a_s / \ln(\kappa_c - \kappa) & \text{if } \kappa_c - \kappa \ll 1, \end{cases} \quad (5.158)$$

где $\kappa_c = \ln 2$, а правая граница — уравнением

$$a_2 = -\frac{\kappa a_s}{\ln \left[\frac{1}{2} (-1 + \sqrt{1 + 8e^{-\kappa}}) \right]} \simeq \begin{cases} \frac{3}{2}a_s \left(1 - \frac{1}{18}\kappa \right) & \text{if } \kappa \ll 1, \\ a_s(1 + \kappa^{-1} \ln 2) & \text{if } \kappa \gg 1. \end{cases} \quad (5.159)$$

Из уравнения (5.155) следует что для малых $V_{\min}$ ФвдМ границы ведут себя линейно относительно $V_{\min}$ (см. рис. 5.21),

$$a_{\min} \simeq a_q \pm 2V_{\min} \frac{\kappa}{a_s} e^\kappa \frac{[\varphi(q-1) - \varphi(q)]^2}{(q-1)\varphi(q-1) - q\varphi(q)}, \quad (5.160)$$

где

$$\varphi(q) = \exp(-\kappa q a_s / a_q) [e^\kappa \exp(-\kappa q a_s / q a_q) - 1]. \quad (5.161)$$

В пределе сильного взаимодействия, когда $K \equiv 1/V_{\min} \rightarrow 0$, ФвдМ пределы задаются уравнением $\varepsilon_k^\sigma = 0$, где энергия создания кинка дается уравнениями (5.152) – (5.154). В частности, при $|P_q| \ll 1$ следует, что

$$P_{FM}^{\sigma=\pm 1}(q) \simeq \frac{q}{\kappa a_s} \left(-4\sigma\sqrt{2K} - K \right). \quad (5.162)$$

Таким образом, в ФвдМ пределе, соответствующие отрицательному несоответствию (растяжению цепи), возрастают по абсолютному значению с ростом ангармоничности κ , а пределы соответствующие положительному несоответствию (сжатие цепи) – убывают [509, 512].

Фазовая диаграмма Морсе-ФК модели схематически показана на рис. 5.21. В выпуклых областях плоскости (P, K) , то есть, для малых значений K , переходы между различными фазами являются непрерывными и проявляют структуру дьявольской лестницы подобно классической модели ФК. В невыпуклых областях, например, при отрицательном P ниже значения P_{inf} , переход из тривиального ОС в кноидально-волновое может быть разрывным [513], так что плотность кинков будет скачком изменяться от нуля до некоторого ненулевого значения (см. рис. 5.23). Заметим, что средняя плотность кинков всегда меньше при отрицательных значениях параметра несоответствия [509, 512]. Как можно видеть из рис. 5.21, существует значение K выше которого все переходы являются переходами первого рода. Области переходов первого рода и второго рода разделены друг от друга граничным слоем, в котором фазовая диаграмму имеет чрезвычайно сложную структуру, появляющуюся на очень малых шкалах длины.

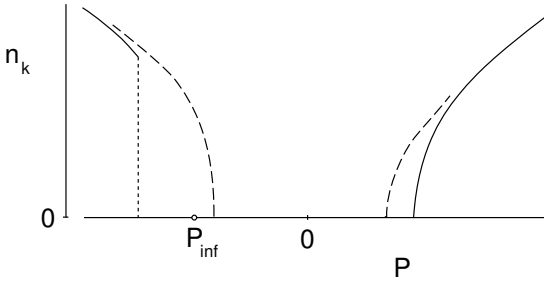


Рис. 5.23. Зависимость средней плотности кинков n_k от параметра несоответствия P при фиксированном значении κ для модели Морсе-ФК (схематически). Сплошная кривая: $V_{\min} = 2$, $|P_{FM}^-| > |P_{\text{inf}}|$ (невыпуклая область), пунктирная кривая: $V_{\min} = 6$, $|P_{FM}^-| < |P_{\text{inf}}|$ (выпуклая область).

Марков и Траянов [512] исследовали численно метастабильные пределы $P_{ms}^{\pm}$ существования тривиальной конфигурации с $\theta = 1$ (см. рис. 5.24). Они нашли, что для положительного несоответствия отношение $\nu = P_{ms}^+ / P_{FM}^+$ как функция от $K \equiv 1/V_{\min}$ резко убывает начиная от стандартного ФК значения $\nu = \pi/2$ при $K \rightarrow 0$ и идет асимптотически к 1 при $K \rightarrow \infty$. Это значит что при $K \geq 1$ интродукция антикинков вне P_{FM}^+ границы происходит фактически без преодоления энергетического барьера. При отрицательном несоответствии, Марков и Траянов [512] получили интересный эффект, что концевые части Морсе-ФК цепи со “свободными концами” всегда являются искаженными независимо от значения $V_{\min}$ при выполнении неравенства $P < P_{\text{inf}}$, то есть концы оказываются модулированными даже когда средняя (“основная”) часть цепи остается неискаженной. Это показывает, что конечный атом не поднимается на склоны потенциальной ямы с увеличением несоответствия (по абсолютной величине) и это исключает возможность спонтанной интродукции кинков на свободном конце цепи. Следовательно, тривиальная конфигурация будет существовать как метастабильное состояние при любом значении $P < P_{\text{inf}}$ если межатомный потенциал достаточно слаб. Так, метастабильный предел P_{ms}^- ниже которого тривиальная конфигурация не может существовать, исчезает в точке где $P_{ms}^- = P_{\text{inf}}$ (см. рис. 5.24).

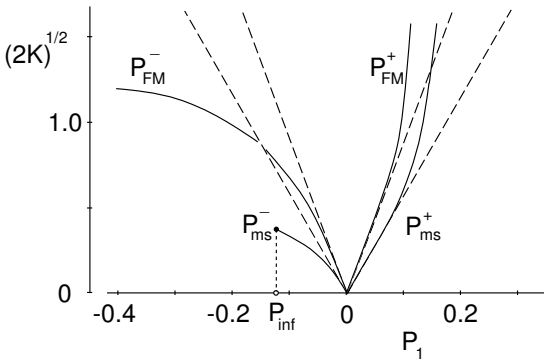


Рис. 5.24. ФвдМ пределы несоответствия $P_{FM}^{\pm}$ и метастабильные пределы $P_{ms}^{\pm}$ модели Морсе-ФК для тривиального $\theta = 1$ ОС при фиксированном значении параметра κ (схематически). $K = 1/V_{\min}$. Точечные линии соответствуют гармоническому пределу [512].

В некоторых физических ситуациях ФК цепочка со “свободным концом” может подвергаться внешнему давлению Π , например, в случае когда ФК система находится в контакте с резервуаром атомов, в роли которого для адсорбционных систем может выступать фаза пара, с фиксированным химическим потенциалом μ , в то

время как длина L цепи остается фиксированной (например, из-за конечного размера подложки). В этом случае модель Морсе-ФК обладает четырьмя независимыми параметрами [$V_{\min}$, κ , $a_{\min}$, и Π]. Заметим, что теперь $a_{\min}$ тоже является одним из модельных параметров (минимум взаимодействия достигается при значении $x = a_{\min}^{(\Pi)}$ определяемом из уравнения $dV_{\text{int}}^{(\Pi)}(x)/dx = 0$). Отметим, что изменение Π ограничено неравенством $\Pi \geq 0$. Фазовая диаграмма этой системы может быть построена аналогично предыдущему случаю с использованием потенциала (5.150) вместо потенциала Морса.

Теория систем Морса-ФК имеет важное приложение в исследовании роста кристаллов. В частности, при создании новых устройств необходимо образовывать эпитаксиальную поверхность раздела где любой ценой нужно избежать сдвиговых дислокаций [514], так чтобы псевдоморфическое состояние пленки должно иметь межатомный шаг роста который точно равен периоду атомов подложки. Фазовая диаграмма на рис. 5.21 предсказывает, что в этом случае мы должны выбрать такую комбинацию подложки и кристаллического сверхслоя для которой естественное несоответствие P_1 является отрицательным [509, 512].

Другим интересным примером невыпуклого межатомного взаимодействия является осцилляционный потенциал

$$V_{\text{int}}(x) = g [1 - \cos(x - a_{\min})]. \quad (5.163)$$

ФК модель с потенциалом (5.163) описывает одномерную систему классических плоских спинов с хиральным взаимодействием ближайших соседей в присутствии внешнего магнитного поля. Кроме того, осцилляционные потенциалы возникают при Рудерман-Киттель взаимодействии магнитных примесей в металлах, так и при “непрямом” взаимодействии атомов на поверхности металла [36].

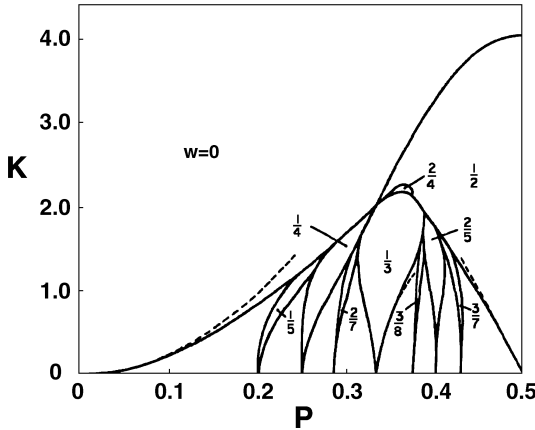


Рис. 5.25. Фазовая диаграмма ФК модели с осцилляционным межатомным потенциалом (5.163) в (P, K) плоскости. Фазы пронумерованы значениями параметра w [282].

Полная фазовая диаграмма ФК модели со “свободным концом” (5.163) была вычислена Йюкои с соавторами [282] используя метод эффективного потенциала (см. рис. 5.25). В выпуклой области фазовой диаграммы, то есть при $K \rightarrow 0$ ($g \rightarrow \infty$) в рис. 5.25, поведение модели является подобным поведению стандартной ФК системы, с непрерывными переходами между различными фазами. Когда значение g убывает, эффект защепления на С-фазах становится более выраженным и в конечном счете вынуждает систему использовать вогнутую часть потенциала $V_{\text{int}}(x)$. В невыпуклой области появляются модулированные фазы (см. тривиальное ОС с $w = \frac{1}{2}$ и модулированное ОС с $w = \frac{2}{4}$ на рис. 5.25). Формы кинков в этой области могут иметь экспоненциально затухающие осцилляции, приводящие к энергии кинк-кинкового взаимодействия, знак которой будет изменяться как функция от расстояния между кинками. В результате, переходы, например, $0 \leftrightarrow \frac{1}{4}$ и $0 \leftrightarrow \frac{1}{3}$ имеет первый порядок, так как они обусловлены появлением кинков притягивающихся друг к другу. Заметим, что эта модель вызываемого фононами перехода $\frac{1}{2} \leftrightarrow \frac{2}{4}$ является также разрывной. При дальнейшем уменьшении g , все больше и больше фазы исчезают через эффект защепления и в конечном счете у нас остается только конечное число фаз. Наконец, при $g < \frac{1}{4}$ существует только тривиальное ОС.

Важным дополнительным свойством невыпуклых моделей является присутствие на фазовой диаграмме бесконечного числа супер-вырожденных точек, многие из которых являются много-фазовыми точками (см. детали в работах [282, 286]). В этих точках ОС состоит из невзаимодействующих кинков имеющих нулевую энергию с конечной плотностью кинков, так что различные фазы имеют общее значение энергии. Следовательно, в этих точках система имеет остаточную энтропию и нарушается третий закон термодинамики.

Таким образом, поведение одномерной ФК модели с несинусоидальным потенциалом подложки и невыпуклыми межатомными взаимодействиями может быть экстремально сложным даже при нулевой температуре. В следующей главе мы рассмотрим свойства модели при отличных от нуля температурах.

Статистическая физика

Во всех предыдущих главах мы обсуждали только изолированные ФК цепочки. В континуальном приближении уравнения движения частиц в такой модели сводится к интегрируемому СГ уравнению, обладающему регулярной динамикой. В противоположность этому, дискретная ФК модель не является интегрируемой и, в общем случае, ее динамика может быть хаотической. Когда полная энергия цепочки меньше некоторого порогового значения, движения системы являются почти регулярными, а хаотические слои в фазовом пространстве – экспоненциально малы. Однако, для высоких значений энергии динамика системы по большей части будет стохастической и в стохастическом режиме система быстро приближается к состоянию с равным распределением энергии по всем степеням свободы, так что динамику ФК цепочки уже может быть описана методами статистической механики. Этот подход является главной темой данной главы.

6.1 Вводные замечания

Модель ФК является Гамильтоновой системой и, как обычно для таких систем, для нее существует *пороговая энергия* $E_{th} \propto a_A^2$ (см., например, работу [515]) такая, что если общая энергия цепи меньше данного порогового значения, то есть если $E < E_{th}$, то динамика системы уже является почти регулярной (то есть хаотические слои в фазовом пространстве будут экспоненциально малы), а при высокой энергии, когда $E > E_{th}$, динамика системы в основном хаотична. Гедде с соавторами [515] показали, что этот переход является довольно резким и система быстро приближается к состоянию хаотического режима с равным распределением энергии по всем степеням свободы. В силу этого свойства динамики ФК цепочки могут быть описаны в рамках статистической механикой.

Кроме того, в большинстве физических приложений ФК модели цепочка атомов описывает не изолированный объект, а только часть целой системы. Поэтому, всегда существует энергетический обмен между цепочкой ФК и подложкой, так что необходимо учитывать взаимодействие цепочки с тепловой "баней", которое можно анализировать методами статистической механики.

Пайерлс [516] первым показал, что при любой температуре $T \neq 0$ в одномерных системах отсутствует дальний порядок, любое упорядоченное состояние всегда разрушается тепловыми флуктуациями. В силу этого, фазовая диаграмма ФК модели при $T \neq 0$ будет выглядеть просто: существует только одна (неупорядоченная) фаза и только один фазовый переход, непрерывный *переход порядок-беспорядок*, при критической температуре $T_c = 0$. Тем не менее, начиная с пионерской работы of Крумханс и Шриффер [517], статистическая механика моделей ФК-типа была очень интенсивно изучена (см., например, статьи [518, 519] и приведенные в них ссылки). Этот интерес вызван следующими причинами:

1. При $T \neq 0$ поведение твердотельной системы может быть понято в терминах ее низко-энергетических возбуждений. В пределе сильного взаимодействия когда становится допустимым уравнение СГ, то есть при $g \rightarrow \infty$, система точно интегрируема при помощи обратного преобразования рассеяния (здесь существует каноническое преобразование к обобщенным переменным действие-угол, которые классифицируют все типы элементарных возбуждений). Таким образом, цепочка ФК в пределе сильного взаимодействия идеально подходит для феноменологической формулировки классической статистической физики нелинейных систем, так как, с одной стороны, она является системой сильно взаимодействующих атомов, в то время как с другой стороны, ее можно рассматривать как систему слабо взаимодействующих квазичастиц.
2. В противоположном случае слабых межатомных взаимодействий, $g \ll 1$, ФК модель далека от интегрируемой системы. В этом случае, стандартное отображение модели обладает бесконечным (несчетным) числом хаотических орбит. Несчетное подмножество этих орбит соответствует метастабильным состояниям, которые описывает ФК конфигурации со случайно закрепленными кинками. Таким образом, возбужденные состояния

модели являются пространственно неупорядоченными и, следовательно, ФК модель является естественной физической системой для изучения стекло-подобного поведения аморфных тел. Кроме того, это единственная или наилучшая из известных моделей, в которой стекло-подобное поведение возникает как ее внутреннее свойство, а не введено искусственно.

3. В силу одномерной природы ФК модели, она имеет формально точное решение, которое дается методом трансфер-интеграла. Таким образом, эта модель является идеальной основой для проверки применимости различных приближенных методов, используемых при изучении нелинейных систем.
4. Наконец, поведение модели при $T \neq 0$ важно для ее многочисленных физических приложений, которые обсуждались ранее.

Мы начнем с обсуждения общего формализма и основных обозначений, которые затем будут использованы во всей этой главе. Мы ограничим наше исследование случаем межатоминого потенциала с равновесным расстоянием $a_{\min} = a_s$, так чтобы безразмерная концентрация θ была примерно равной 1. Обычно мы рассматриваем $\theta \leq 1$, но это предположение не является важным из-за кинк-антикинкковой симметрии. Развитая ниже физическая картина может быть одинаково хорошо применена к динамике вблизи любой стационарной С-фазы с $\theta \neq 1$, использованной в качестве фоновой структуры. Единственное отличие – то, что в последнем случае мы должны использовать фоновый спектр, соответствующий данной С-фазе, и формализм "суперкинков" вместо формализма кинков.

6.2 Общий формализм

Обсудим вначале общий формализм и введем основные обозначения которые будут использованы в этой главе. Заметим, что когда $\theta < 1$ основное состояние модели при $T = 0$ описывается кноидальной волной антикинков на фоне тривиальной фазы с $\theta_0 = 1$. Обозначим общее число этих "остаточных" ("геометрических") кинков через N_w . При $N_w > 0$ параметр

$$\tilde{w} = N_w/N \quad (6.1)$$

совпадает с параметром соразмерности w определенным в уравнении (5.3). Таким образом, мы будем рассматривать ФК цепочку длины

$$L = Ma_s, \quad (6.2)$$

которая обладает полным топологическим зарядом N_w и имеет N атомов на M минимумов потенциала, где

$$M = N + N_w. \quad (6.3)$$

Когда температура системы отлична от нуля, остаточные кинки дополняются термически возбужденными кинк-антикинкковыми парами, число которых мы обозначим через N_{pair} . Таким образом, состояние системы при $T \neq 0$ характеризуется числом фононов и/или бризеров N_b ("бризерная проблема" будет рассмотрена в следующем параграфе), числом кинков N_k и антикинков $N_{\bar{k}}$ ($N_k = N_{\text{pair}}$ и $N_{\bar{k}} = N_{\text{pair}} + N_w$ при $N_w > 0$, в то время как при $N_w < 0$ мы должны положить $N_k = N_{\text{pair}} - N_w$ и $N_{\bar{k}} = N_{\text{pair}}$). Полезно также ввести общее число кинков,

$$N_{\text{tot}} = N_k + N_{\bar{k}} = 2N_{\text{pair}} + |N_w|, \quad (6.4)$$

и соответствующие концентрации, $n_x = N_x/L$, где индекс " x " значит либо " w ", " pair ", " k ", " $\bar{k}$ ", " tot ", или " b ".

Для ФК цепочки с "фиксированной плотностью", в которой значения N и L фиксированы в силу наложенного периодического граничного условия $x_{N+1} = x_1 + L$, корректное термодинамическое описание модели можно дать в терминах свободной энергии Гельмгольца

$$F(T, L, N) = -k_B T \ln \mathcal{Z}(T, L, N), \quad (6.5)$$

где k_B – постоянная Больцмана, а $\mathcal{Z}$ описывает канонический ансамбль,

$$\mathcal{Z}(T, L, N) = \sum_{\{\xi_i\}} \exp[-\beta E(\{\xi_i\})], \quad (6.6)$$

$\beta = 1/k_B T$, E – общая энергия системы в состоянии характеризуемым в фазовом пространстве независимыми координатами ξ_i .

Для ФК цепи со "свободными концами", когда система находится под действием внешнего давления Π , мы должны вычислить статистическую сумму

$$Y(T, \Pi, N) = \int_0^\infty dL \mathcal{Z}(T, L, N) \exp(-\beta \Pi L), \quad (6.7)$$

а соответствующим термодинамическим потенциалом будет свободная энергия Гиббса

$$G(T, \Pi, N) = -k_B T \ln Y(T, \Pi, N) = F + \Pi L. \quad (6.8)$$

Энергия Гиббса позволяет нам найти равновесную длину цепи, которая образуется под действием давления Π ,

$$\langle L \rangle = \left(\frac{\partial G}{\partial \Pi} \right)_{T, N}. \quad (6.9)$$

Из уравнений (6.1), (6.2), (6.3), и (6.9) следует что среднее значение параметра соразмерности определяется выражением

$$\langle \tilde{w} \rangle = -1 + \frac{1}{L_0} \left(\frac{\partial G}{\partial \Pi} \right)_{T, N}, \quad (6.10)$$

где $L_0 = Na_s$ – длина цепи при $\Pi = 0$.

Другие термодинамические потенциалы могут быть определены стандартным способом: энтропия системы задается выражением

$$S(E, L, N) = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{L, N} = - \left(\frac{\partial G}{\partial T} \right)_{\Pi, N}, \quad (6.11)$$

а общая энергия равна

$$E(S, L, N) = F + TS = \left[\frac{\partial(\beta F)}{\partial \beta} \right]_{L, N}. \quad (6.12)$$

Кроме того, можно ввести химический потенциал как,

$$\mu = \left(\frac{\partial F}{\partial N} \right)_{T, L} = \left(\frac{\partial G}{\partial N} \right)_{T, \Pi} = \left(\frac{\partial E}{\partial N} \right)_{S, L}, \quad (6.13)$$

и теплоемкость приходящуюся на один атом,

$$c_N = \frac{1}{N} \frac{dE}{dT} = - \frac{T}{N} \left(\frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \right)_{L, N}. \quad (6.14)$$

Главную роль в статическом и динамическом поведении модели играет безразмерная восприимчивость χ , которая определяется как

$$\chi = \frac{\langle (\Delta \tilde{N})^2 \rangle}{\langle \tilde{N} \rangle}, \quad (6.15)$$

где $\tilde{N}$ – число атомов на фиксированной длине $\tilde{L}$, $d \ll \tilde{L} \ll L$, и $\Delta \tilde{N} = \tilde{N} - \langle \tilde{N} \rangle$ – флуктуации числа $\tilde{N}$. Как хорошо известно, для невзаимодействующих атомов (то есть в пределах $g \rightarrow 0$ или $T \rightarrow \infty$) мы должны иметь $\chi = 1$, так что отклонение χ от 1 характеризует роль нелинейных взаимодействий. В стандартном подходе χ может быть выражена через химический потенциал μ ,

$$\chi = \left\{ \beta N \left(\frac{\partial \mu}{\partial N} \right)_{T, L} \right\}^{-1}, \quad (6.16)$$

или через концентрацию атомов $n = N/L$,

$$\chi = k_B T \left(\frac{\partial \langle n \rangle}{\partial \Pi} \right)_{T, L}. \quad (6.17)$$

Для ФК цепи со “свободными концами” также удобно определить χ через параметр соразмерности $\tilde{w}$,

$$\chi = -k_B T a_s n^2 \left(\frac{\partial \langle \tilde{w} \rangle}{\partial \Pi} \right)_{T, N} = -k_B T \frac{n^2}{N} \left(\frac{\partial^2 G}{\partial \Pi^2} \right)_{T, N}. \quad (6.18)$$

Заметим, что везде в этой части используется термодинамический предел $N, L \rightarrow \infty$.

При низких температурах, $k_B T \ll \varepsilon_k$, и нулевом параметре соразмерности $N_w = 0$, во всех термодинамических функциях доминирует вклад фононов, так как плотность термически возбужденных кинков экспоненциально мала. Используя закон дисперсии для ФК оптических фононов, $\omega^2(\kappa) = \omega_0^2 + 2g(1 - \cos \kappa)$, $|\kappa| \leq \pi$, мы получим

$$F_{\text{ph}}^{(0)} = Nk_B T \int_{-\pi}^{+\pi} \frac{d\kappa}{2\pi} \ln[\beta \hbar \omega(\kappa)]$$

$$= Nk_B T \ln \left(\beta \hbar \sqrt{g/m_a + \omega_0(\omega_0 + \omega_{\text{max}})/2} \right), \quad (6.19)$$

$$s_N \equiv S/N = k_B \left[1 - \ln \left(\beta \hbar \sqrt{g/m_a + \omega_0(\omega_0 + \omega_{\text{max}})/2} \right) \right], \quad (6.20)$$

$$\varepsilon_N \equiv E/N = k_B T, \quad (6.21)$$

$$\mu = k_B T \ln \left(\beta \hbar \sqrt{g/m_a + \omega_0(\omega_0 + \omega_{\text{max}})/2} \right), \quad (6.22)$$

$$c_N = k_B \quad (\text{закон Дюлонга и Пти}), \quad (6.23)$$

$$\chi = k_B T / a_s^2 \left(g + \frac{1}{3} \omega_0^2 N^2 \right) \rightarrow 0 \quad \text{for } N \rightarrow \infty, \quad (6.24)$$

где для стандартной ФК модели: $\omega_{\text{max}} = \sqrt{\omega_0^2 + 4g}$ и $\omega_0 = 1$. Ангармоничные поправки к фононным вкладам могут быть вычислены при помощи стандартной теории возмущений если потенциал $\delta V(u) = V_{\text{sub}}(u) - (1/2)m_a\omega_0^2 u^2$ рассмотреть как малое возмущение [520].

Однако, даже при низких температурах, кинки достаточно важны для нескольких свойств ФК системы. Прежде всего, именно термически возбужденные кинк-антикиновые пары разрушают дальний порядок регулярной ФК конфигурации. Как можно видеть из рис. 6.1, где среднее значение параметра соразмерности $\langle \tilde{w} \rangle$ представлено как функция давления P , при любой $T \neq 0$ дьявольская лестница размывается тепловыми колебаниями. Однако, даже при умеренных температурах, $k_B T \leq \varepsilon_k$, несколько ступеней дьявольской лестницы продолжают оставаться хорошо определенными, то есть при $w = 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{3}$. Как будет показано в параграфе 6.5.4, температура “плавления” T_m для структуры с концентрацией θ зависит от энергии рождения “суперкинка” $E_k^\sigma(\theta, P)$, $k_B T_m(\theta) \simeq E_k^\sigma(\theta, P)$. Повторим, во первых, что значение E_k^σ уменьшается когда “порядок” С-фазы (то есть число атомов на одну элементарную ячейку) возрастает, и во вторых, что энергия рождения кинка является наибольшей в центре ступеней дьявольской лестницы и она стремится к нулю при приближении к краям ступеней (то есть в точках где возможны ФвдМ переходы). Поэтому, с ростом температуры системы, первыми разрушаются С-фазы характеризующиеся сложной элементарной ячейкой, в то время как простейшая (тривиальная) С-фаза с $w = 0$ ($\theta = 1$) разрушается в последнюю очередь. Кроме того, кинки дают основной вклад в восприимчивость χ и в “кинк-восприимчивые” статические корреляционные функции так же как приводят к существенному вкладу в другие термодинамические свойства (например, кинки отвечают за Шотки пик в температурной зависимости теплоемкости).

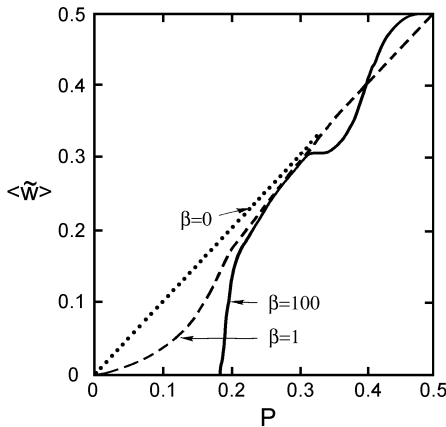


Рис. 6.1. Среднее значение параметра соразмерности $\langle \tilde{w} \rangle$ как функция параметра $P = \Pi / g a_s$ для стандартной модели ФК с $g = 1$ при разных температурах: $\beta = 100$ (сплошная кривая), $\beta = 1$ (пунктирная кривая) и $\beta = 0$ (точечная кривая). Зависимости были вычислены при помощи техники интеграла преобразования [521].

В пределе слабого взаимодействия, $g \ll 1$, низкотемпературное поведение ФК модели является достаточно интересным из-за наличия сильных эффектов пининга. В этом случае кинки могут быть рассмотрены как квазичастицы в рамках решеточно-газовой модели с малым экспоненциально убывающим взаимодействием частиц. Модель обладает стекло-подобным поведением с фрактальной структурой спектра возбуждений. Как будет показано, ФК модель при $g \ll 1$ дает микроскопическое обоснование “двух-уровневой” системы с малыми щелями, существование которых при описании неупорядоченных систем в работах [522, 523] было принято искусственно. Поэтому, при $g \ll 1$ модель ФК может быть использована для объяснения низкотемпературного пика у теплоемкости аморфных тел.

Когда температура не является малой, т.е. когда $k_B T \geq \varepsilon_k$, число термически возбужденных кинков является большим, $N_{\text{pair}} \sim N$, и модель решетки кинков перестает быть применимой. В пределе $T \rightarrow \infty$ потенциал подложки $V_{\text{sub}}(x)$ становится постепенно несущественным, так как он является ограниченной функцией. Таким образом, как нулевое приближение здесь мы уже можем взять гармонический гамильтониан ($a_A = L/N$)

$$H_0 = \sum_l \left\{ \frac{1}{2} \dot{x}_l^2 + \frac{g}{2} (x_{l+1} - x_l - a_A)^2 \right\} + E_0, \quad E_0 = \frac{g}{2} N (a_A - a_s)^2, \quad (6.25)$$

который описывает акустические фононы с законом дисперсии $\omega^2(k) = 2g[1 - \cos(ka_A)]$, где $|k| \leq \pi/a_A$. Тогда, в нулевом порядке приближения термодинамические характеристики:

$$F = N k_B T \ln \left(\beta \hbar \sqrt{g/m_a} \right) + E_0, \quad (6.26)$$

$$s_N = k_B \left[1 - \ln \left(\beta \hbar \sqrt{g/m_a} \right) \right], \quad (6.27)$$

$$\varepsilon_N = k_B T + \frac{g}{2} (a_A - a_s)^2, \quad (6.28)$$

$$\mu = k_B T \ln \left(\beta \hbar \sqrt{g/m_a} \right) + \frac{1}{2} g (a_A - a_s)^2, \quad (6.29)$$

$$c_N = k_B, \quad (6.30)$$

$$\chi = k_B T / g a_A^2. \quad (6.31)$$

Потенциал подложки $V_{\text{sub}}(x)$ может быть рассмотрен как малое возмущение [520], которое ведет, например, к коррекции теплоемкости

$$c_N \approx k_B \left(1 + \frac{1}{2} \beta^2 \right). \quad (6.32)$$

Заметим, что восприимчивость (6.31) в пределе $T/g \rightarrow \infty$ демонстрирует нефизическое поведение. Причиной этого является немалое относительное смещение атомов, так что гармоническое приближение для потенциала взаимодействия $V_{\text{int}}(x)$ в этом случае не является адекватным. Учет ангармоничности межатомного потенциала позволяет воспроизвести правильный предел $\chi \rightarrow 1$ при $T \rightarrow \infty$.

В заключение заметим, что статистическая механика предполагает применимость гипотезы Больцмана о молекулярном хаосе или о равном распределении энергии между всеми степенями свободы. Конечно, достоверность этого предположения в нашем случае не доказана. Более того, система СГ является интегрируемой системой и поэтому в пределе $g \rightarrow \infty$ она не приближается к тепловому равновесию. Мы отложим обсуждение этого вопроса до следующей главы, так как сам механизм термализации не играет существенной роли в свойствах равновесного состояния системы (однако, он является достаточно важным для динамического поведения системы). В этой главе мы просто предполагаем, что ФК цепочка находится в тепловом резервуаре с температурой T .

6.3 Предел слабых связей: стеклоподобные свойства

Из-за эффектов дискретности модель ФК всегда имеет устойчивые конфигурации соответствующие минимумам потенциальной энергии системы. Одной из этих конфигураций является основное состояние системы, а остальные описывают метастабильные состояния. Мы будем называть метастабильные состояния конфигурационными возбуждениями системы с целью различить их от динамических возбуждений таких как фононы, бризеры и двигающиеся кинки (Волет и др. [528] предпочитают для этих метастабильных возбуждений использовать название “несоизмеримости”]. При $g = 0$ число конфигурационных возбуждений Ω ФК цепи со “фиксированной плотностью” равно $\Omega_0 = N!/M!(N-M)! - 1$. С возрастанием g число Ω монотонно стремится к нулю. Нулевое значение достигается либо при $g = \infty$ (для соразмерной структуры), либо при $g = g_{\text{Aubry}}$ (в случае несоизмерной концентрации, см. работу [524], когда, как показано на рис. 6.2, энергия $\varepsilon_{PN} = 0$).

Естественно, возникают следующие вопросы: (i) какова природа конфигурационных возбуждений, (ii) каково их энергетическое распределение, и (iii) насколько велик вклад этих возбуждений в термодинамические характеристики системы.

На все эти вопросы можно ответить сведя ФК модель к модели решеточного газа и рассматривая сильно пинингованные кинки как квазичастицы находящиеся в периодическом ПН потенциале.

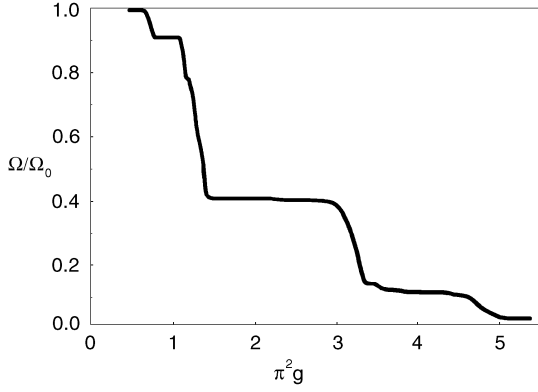


Рис. 6.2. Зависимость числа конфигурационных возбуждений Ω от g для ФК цепочки с фиксированной плотностью при $N/M = 13/17$ [525].

6.3.1 Модель Изинга

Давайте пронумеруем минимумы потенциала подложки $V_{\text{sub}}(x)$ индексом j , $j = 1, 2, \dots, M$, и введем вместо координаты атома x_l , где l – номер атома, две новых переменных, – номер ямы занятой атомом l ,

$$j_l = \text{int} \left(\frac{x_l}{a_s} + \frac{1}{2} \right), \quad (6.33)$$

и смещение этого атома от дна ямы

$$w_l = x_l - j_l a_s. \quad (6.34)$$

Из определения (6.34) следует что

$$|w_l| < a_s/2. \quad (6.35)$$

Для некоторой данной последовательности $\{j_l\}$ соответствующий набор смещений $\{w_l\}$ однозначно определяется как решение стационарных уравнений

$$\frac{\partial U}{\partial w_l} = 0, \quad (6.36)$$

где $U(\{x_l\}) \equiv U(\{j_l\}, \{w_l\})$ – потенциальная энергия системы. Следовательно, все конфигурационные возбуждения однозначно определяются последовательностью возрастающих целых чисел $\{j_l\}$. Таким образом, если мы опустим динамические возбуждения системы, то ФК модель сведется к модели решеточного газа. Далее, давайте рассмотрим ФК цепь с фиксированной плотностью при концентрации $\theta < 1$, и предположим, что каждая яма может быть занята не более чем одним атомом. Тогда, вместо набора $\{j_l\}$ более удобно использовать набор $\{s_l\}$, где $s_l = 0, 1, 2, \dots$ задает число пустых потенциальных ям лежащих между l -ым и $(l+1)$ -ым атомами. Из соотношения $N(1 + \langle s_l \rangle) = M$ мы получаем

$$\langle s_l \rangle \equiv \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N s_l = \frac{(1 - \theta)}{\theta}. \quad (6.37)$$

Таким образом, этим способом мы приходим к модели спиновой цепочки с постоянной намагниченностью [525, 526].

Ясно, что набор $\{j_l\}$ соответствующий конфигурационному возбуждению не является произвольной последовательностью целых чисел. Некоторые последовательности, которые приводят к очень большим смещениям w_l , $|w_l| > \frac{1}{2}a_s$ должны быть исключены. Это ограничение приблизительно может быть выполнено, если мы пренебрежем конфигурациями со слишком большими отклонениями s_l от среднего значения $\langle s_l \rangle$ задаваемого уравнением (6.37), то есть, если мы ограничим возможные значения s_l интервалом $\langle s_l \rangle - \frac{1}{2}\Delta s \leq s_l \leq \langle s_l \rangle + \frac{1}{2}\Delta s$. Длина этого интервала Δs будет убывать с возрастанием параметра g . В частности, при $g \ll 1$ и $0.7 < \theta < 1$ разумно предположить что s_l может быть только 0 или 1, так что ФК модель сводится к модели Изинга.

Для того чтобы найти параметры этой спиновой цепочки, мы должны решить уравнение (6.36). При $g \ll 1$ смещения w_l должны быть малыми, $|w_l| \ll \frac{1}{2}a_s$, и мы можем приблизить потенциал подложки $V_{\text{sub}}(x)$ выражением

$$V_{\text{sub}}(x_l) \simeq \frac{1}{2}\omega_0^2 w_l^2. \quad (6.38)$$

В результате этого, уравнения движения (6.36) станут линейными относительно w_l и, поэтому могут быть решены стандартными методами [525, 527]. Заметим однако, что приближение (6.38) не позволяет атомам

переходить из одной потенциальной ямы в другие соседние ямы. Поэтому эта простая модель не может быть использована для описания таких динамических свойств как транспорт массы вдоль ФК цепочки.

Используя уравнения (6.34), (6.38) и соотношение $j_{l+1} = j_l + 1 + s_l$, стационарное уравнение (6.36) можно записать в форме

$$w_{l+1} - 2hw_l + w_{l-1} = \phi_l \quad (6.39)$$

с

$$\phi_l = a_s(s_{l-1} - s_l), \quad (6.40)$$

$$h = 1 + \omega_0^2/2g. \quad (6.41)$$

Введем функцию Грина G для разностного оператора левой части уравнения (6.39). Тогда решение уравнения (6.39) можно записать в виде

$$w_l = \sum_{l'} G(l - l') \phi_{l'}. \quad (6.42)$$

Можно легко получить, что преобразование Фурье функции Грина

$$\tilde{G}(\kappa) \equiv \sum_l G(l) e^{i\kappa l} = -[2(h - \cos \kappa)]^{-1}, \quad |\kappa| \leq \pi. \quad (6.43)$$

Отсюда, методом контурного интегрирования можно получить саму функцию Грина $G(l)$,

$$G(l) \equiv \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} d\kappa \tilde{G}(\kappa) e^{-i\kappa l} = -\frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{h^2 - 1}} \left(h - \sqrt{h^2 - 1} \right)^{|l|}. \quad (6.44)$$

Тогда, подставляя уравнение (6.42) с уравнениями (6.40) и (6.44) в выражение для потенциальной энергии и опуская постоянные члены, мы окончательно получим [525]

$$U = \sum_{l < l'} I(l - l') s_l s_{l'}, \quad (6.45)$$

где

$$I(l) = I_0 \exp(-|l|a_s/\lambda) \quad (6.46)$$

с

$$I_0 = ga_s^2 \omega_0 / \omega_{\max} \simeq ga_s^2 / (1 + 2g) \quad (6.47)$$

и

$$\lambda = -a_s \left/ \ln \left(\frac{\omega_{\max} - \omega_0}{\omega_{\max} + \omega_0} \right) \right. \approx -a_s / \ln g, \quad (6.48)$$

$$\omega_{\max} = \sqrt{\omega_0^2 + 4g} \simeq 1 + 2g. \quad (6.49)$$

Таким образом, мы получили аналог модели Изинга с экспоненциально убывающей постоянной взаимодействия. Физическая интерпретация уравнения (6.45) тривиальна, если мы вспомним, что s_l означает число антикинков, а $I(l)$ описывает антикинк-антикинковое отталкивание при $g \ll 1$.

6.3.2 Конфигурационные возбуждения

Конфигурационные возбуждения ФК модели, $\{x_l\}$, могут быть рассмотрены как элементы множества $\tilde{\mathcal{C}}$. Согласно параграфу 6.3.1, при $g \ll 1$ состояние $\tilde{\mathcal{C}}$ является изоморфным относительно множества $\tilde{\mathcal{M}}$ состоящего из конфигураций $\{s_l\}$ в модели спиновой цепочки (6.45). В этом множестве $\tilde{\mathcal{M}}$ мы можем определить сдвиг Бернулли $\hat{S} : \tilde{\mathcal{M}} \rightarrow \tilde{\mathcal{M}}$ как $(\hat{S}s)_l = s_{l+1}$. Эквивалентным оператором в множестве $\tilde{\mathcal{C}}$ будет оператор отображения $\hat{T} : \tilde{\mathcal{C}} \rightarrow \tilde{\mathcal{C}}$ определенный как $(\hat{T}Y)_l = Y_{l+1}$. Модель со сдвигом Бернулли является классической моделью обладающей чисто хаотическим поведением [474]. Заметим однако, что из-за ограничения (6.35), запрещающего некоторые конфигурации, множество $\tilde{\mathcal{M}}$ образует канторовское множество [527]–[529].

Множество $\tilde{\mathcal{M}}$ состоит из счетного множества регулярных (кристаллических) конфигураций, несчетного множества “чисто хаотических” (р-нормальных) конфигураций и также из “смешанных” конфигураций для которых, например, подпоследовательность $\{s_{km}\}$ является регулярной (для фиксированного значения целого k и всех целых m), в то время как значения s_l , для $l \neq km$, будут случайными. Для Ising-like model р-нормальная конфигурация может быть определена как случайная последовательность s_l из единиц (с вероятностью p) и нулей (с вероятностью $1 - p$), так что каждая возможная конечная подпоследовательность бесконечной в обе стороны последовательности $\{s_l\}$ появляется с вероятностью $p^{n_1}(1 - p)^{n_2}$, где n_1 и n_2 обозначают,

соответственно, число единиц и нулей в подпоследовательности. Ясно, что для ФК цепи с фиксированной плотностью вероятность p совпадает со средним значением $\langle s_l \rangle$ задаваемым уравнением (6.37). Заметим, что здесь p -нормальность означает что величины s_l и $s_{l'}$ при $l \neq l'$ будут некоррелированными.

Уравнения (6.34), (6.40), и (6.42) позволяют нам реконструировать метастабильные конфигурации ФК модели соответствующие p -нормальным конфигурациям модели Изинга. В частности, Рейхерт и Шиллинг [527] вычислили функцию распределения $Q_l(x)$ расстояний между l -тыми ближайшими соседями и парную функцию распределения $Q(x) = \sum_{l=1}^{\infty} Q_l(x)$. Они показали, что эти функции обладают типичным стекло-подобным поведение. А именно, функция $Q(x)$ показывает короткодействующий порядок, то есть у нее есть более или менее выраженные пики соответствующие первым, вторым, и т.д. ближайшим соседям. Однако, на больших расстояниях порядок отсутствует, $\lim_{x \rightarrow \infty} Q(x) = n \equiv N/L$.

Детальное численное исследование низко-энергетических конфигурационных возбуждений классической ФК модели с параметром соразмерности равным золотому среднему $w = (\sqrt{5} - 1)/2$ ниже точки перехода Обри ($g < g_{\text{Aubry}}$) провели Жиров с соавторами [530]. Они получили следующие интересные результаты:

1. Общее число конфигурационных возбуждений растет экспоненциально с увеличением длины ФК цепи;
2. Энергии этих конфигураций как показано на рис. 6.3 организованы в зоны. Низко-энергетические зоны имеют ширину много меньшую чем расстояние между зонами, в то время как для высоких энергий ширина зоны возрастает и в конечном счете соседние зоны почти сливаются. С возрастанием $K \equiv g^{-1}$ каждая зона сдвигается в область меньших значений энергии, но число состояний (приходящихся на один атом) в каждой зоне практически не зависит от K ;
3. Число зон становится большим с увеличением K , а энергии наименьших зон экспоненциально стремятся к энергии основного состояния с возрастанием параметра K или длины цепи (см. рис. 6.4). Если зоны пронумеровать индексом k в порядке возрастания энергии, то среднее значение энергии k -ой низко-энергетической зоны можно описать эмпирической формулой

$$\langle \Delta U_k \rangle \approx C \exp \left(-\alpha w^k N \sqrt{\beta k + \lambda^2} \right), \quad (6.50)$$

где параметр соразмерности $w = (\sqrt{5} - 1)/2$, N – число атомов в цепи, численные значения параметров $\alpha \approx 0.59$, $C \approx 1$, $\beta \approx 0.12$, а λ – экспонента Ляпунова стандартного отображения (5.18) вычисленная на инвариантном канторовом множестве орбит [λ описывает также щель в спектре фононов из-за которой любое стационарное возмущение смещения δx_{i_0} атома i_0 экспоненциально убывает вдоль цепи, $\delta x_i \propto \exp(-\lambda|i - i_0|)$];

4. Энергии конфигурационных возбуждений формируют квази-фрактальную зонную структуру показанную на рис. 6.5. Фрактальная структура становится глубже и глубже с увеличением длины цепи.

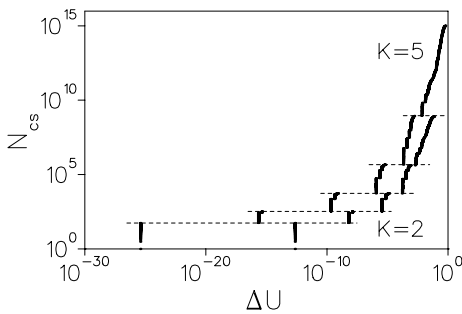


Рис. 6.3. Интегрированное число метастабильных конфигурационных состояний N_{cs} (на частицу) как функция разницы энергии ΔU между E_i и энергией основного состояния E_{GS} , для $\theta = 89/55$, $K = 5$ и $K = 2$, где $K \equiv g^{-1}$. Горизонтальные пунктирные линии показывают границу между энергетическими зонами [530].

Для того чтобы объяснить иерархическую структуру конфигурационных возбуждений, Жиров с соавторами [530] использовали наблюдение, что в основном состоянии значительное число атомов находится очень близко к ямам потенциала подложки. Из рис. 6.6 (левая панель) видно, что величины малых отклонений группируются в трех хорошо различимых иерархических уровнях и межатомные расстояния вдоль цепи для этих атомов также упорядочены: два атома приближающиеся к минимумам ($|\Delta x| \approx 5 \cdot 10^{-25}$) удалены на расстояния 55 и 89, восемь атомов (включая два предыдущих) с отклонениями $|\Delta x| \leq 3 \cdot 10^{-6}$ – на расстояния 13 и 21, и 34 атома с отклонениями $|\Delta x| \leq 10^{-1}$ – на расстояния 3 и 5 (заметим, что все эти расстояния образуют последовательность Фибоначчи s_n , см. рис. 5.1). В дальнейшем давайте будем называть атомы лежащие очень близко к минимумам ям “приклеенными” атомами (g -атомами), так как силы напряжения действующие с двух сторон на каждый такой атом примерно компенсируют друг друга. Теперь давайте разрежем цепь на фрагменты (“блоки”) по приклеенным атомам. Нижайший уровень иерархии, показанный на рис. 6.6 (с отклонениями $|\Delta x| \leq 10^{-1}$), состоит из блоков двух типов, состоящих соответственно из 2 и 4 атомов, так что 8-атомный

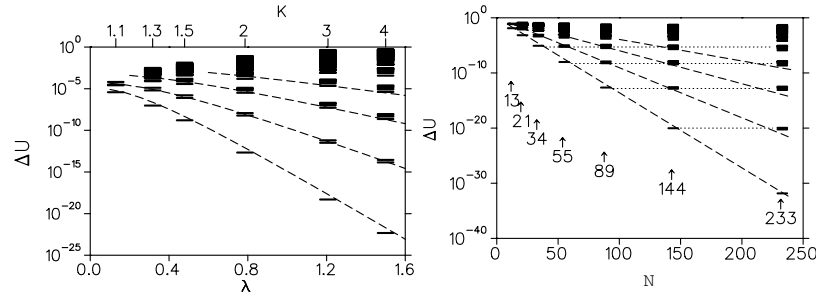


Рис. 6.4. Левая панель: зависимость зон энергетического спектра от параметра K (верхняя шкала) и фононной щели λ (нижняя шкала) для $\theta = 89/55$. Правая панель: зависимость энергии зон от длины цепи (то есть при $N/M = 13/8$, $21/13$, $34/21$, $55/34$, $89/55$, $144/89$ и $233/144$). Зоны обозначены заполненными областями. Пунктирные кривые соответствуют полумпирическому выражению (6.50) [530].

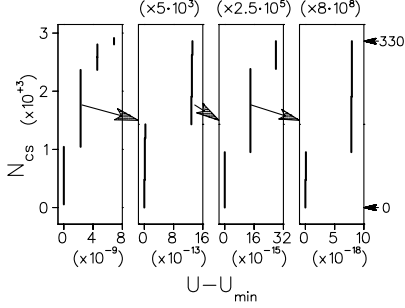


Рис. 6.5. Фрактальная структура третьей энергетической зоны возбуждений для цепи с $K = 4$ и $\theta = 89/55$. Показаны четыре иерархические уровня с возрастающим разрешением. Здесь U – энергия на один атом, а $U_{\min}$ – обозначение для энергии самой левой зоны в каждой панели. Вертикальная шкала N_{cs} дает интегрированное число метастабильных конфигураций отсчитываемое от основания самой левой зоны на каждой панели. Вертикальное увеличение возрастает в десять раз слева на право [530].

блок можно обозначить как $8 = (g2g4)$. Следующий уровень иерархии (с отклонениями $|\Delta x| \leq 3 \cdot 10^{-6}$) имеет блоки $12 = (4g2g4)$ и $20 = (4g2g4g2g4)$, третий уровень иерархии (с отклонениями $|\Delta x| \leq 10^{-24}$) состоит из блоков $54 = (20g12g20)$ и $88 = (20g12g20g12g20)$, и т.д.: если данный уровень иерархии состоит из блоков A и B (с $A < B$), тогда следующий уровень должен быть построен из блоков $A' = (BgAgB)$ и $B' = (BgAgBgAgB)$.

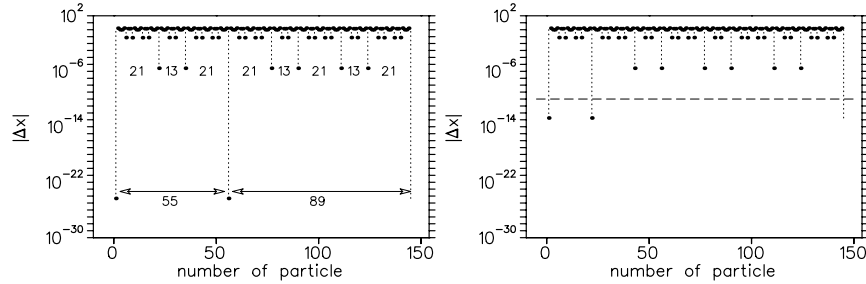


Рис. 6.6. Зависимость абсолютного значения отклонений частиц от ближайших минимумов потенциала подложки от номера атомов для $\theta = 144/89$ и $K = 2$. Левая панель показывает зависимость для основного состояния, в то время как правая панель соответствует возбужденной конфигурации, взятой из первой энергетической зоны возбуждений с $\Delta U \sim 10^{-20}$, когда отклонения приклеенных атомов от минимумов ям $|\Delta x| \leq 10^{-10}$ (пунктирная линия) [530].

Теперь, если мы заменим два различных блока, то концы блоков только слегка изменятся, а энергия системы изменится на величину $\Delta E \propto (\Delta x)^2$. на рис. 6.6 (правая панель) показан пример конфигурационного возбуждения полученного из основного состояния при помощи перестановки блоков на третьем иерархическом уровне [заметим, что для первых двух уровней иерархии, отклонения приклеенных атомов от минимумов ям практически такие же как и в основном состоянии, в то время как на третьем уровне иерархии (ниже пунктирной линии на рис. 6.6) отклонения двух приклеенных атомов становится значительно больше чем их отклонения а ОС]. Так как отклонения приклеенных частиц экспоненциально малы и иерархически упорядочены, то соответствующие энергии конфигураций, полученных при обмене блоками, тоже экспоненциально малы и иерархически упорядочены. Изменение энергии происходящее при перестановке блоков зависит от уровня иерархии, внутри которой сделана эта перестановка. Аналитический подход [530] позволяет сделать оценку $\Delta U \propto \exp(-2\lambda n_{\min})$, где $n_{\min}$ – число атомов в наименьшем блоке данного уровня иерархии. Более того, число конфигураций при любом уровне иерархии является комбинаторно большим, так что число конфигурационных

возбуждений растёт экспоненциально с увеличением длины цепи (в основном это будут неупорядоченные (хаотические) конфигурации).

6.3.3 Двухуровневые системы и теплоемкость

Для того чтобы рассмотреть распределение энергии конфигурационных возбуждений, мы будем следовать работам Петронеро и Штрёслера [526], Петронеро и др. [531] и Рейхерта и Шиллинга [527]. Давайте определим разности

$$\Delta^{(i,i')} = E_i - E_{i'}, \quad (6.51)$$

где $E_i = E(\{x_l^{(i)}\})$ – потенциальная энергия i -го метастабильного состояния. Значения $\Delta^{(i,i')}$ могут быть как положительными, так и отрицательными из-за метастабильности конфигурации i . Из предыдущего обсуждения ясно, что $\Delta^{(i,i')}$ образуют спектр который является канторовым множеством симметричным относительно нуля.

В самом деле, простейший способ получить новую конфигурацию $\{x_l'\}$ из данной $\{x_l\}$ это только передвинуть один из атомов через потенциальный барьер потенциала подложки в ближайшую соседнюю пустую яму потенциала, в то время как все остальные атомы остаются фиксированными. После релаксации цепочка примет новую конфигурацию. Полученные две последовательности $\{j_l\}$ и $\{j_l'\}$ отличаются только одним числом, в то время как положения атомов w_l и w_l' конечно отличаются для всех l , но экспоненциально быстро сходятся друг к другу при $l \rightarrow \pm\infty$. При $\theta < 1$, когда переменные s_l принимают только значения 0 или 1, более удобно обозначить конфигурацию множеством целых чисел m_k , где m_k – число последовательных занятых ям после k -ой пустой ямы. Например, конфигурация $\dots m_1; m_2; m_3; \dots$ означает, что существует вакансия, затем m_1 занятые ямы, вакансия, m_2 занятые ямы, вакансия, m_3 занятые ямы, и т.д. Ясно что

$$\langle m \rangle = (1 - \theta)^{-1}. \quad (6.52)$$

Используя это определение, простейшее перемещение $\{x_l\} \rightarrow \{x_l'\}$ описывается как

$$\dots m_1; m_2; m_3; m_4; \dots \rightarrow \dots; m_1; m_2 - 1; m_3 + 1; m_4; \dots \quad (6.53)$$

Согласно гамильтониану Изинга (6.45), (6.46) этот перемещение дает разность энергии

$$\Delta = \Delta_1 + \Delta_2 + \dots \quad (6.54)$$

с

$$\Delta_1 = I(m_2 - 1) + I(m_3 + 1) - I(m_2) - I(m_3), \quad (6.55)$$

$$\Delta_2 = I(m_2 - 1 + m_1) + I(m_3 + 1 + m_4) - I(m_1 + m_2) - I(m_3 + m_4), \quad (6.56)$$

и т.д. В силу экспоненциального убывания постоянных модели Изинга $I(m)$, мы имеем $\Delta_1 \gg \Delta_2 \gg \dots$, и

$$\Delta_n \simeq I_0(a_s/\lambda)^2 \exp(-n\langle m \rangle a_s/\lambda). \quad (6.57)$$

Как видно, для конфигурации с $m_2 = m_3$ мы имеем $\Delta \simeq \Delta_1$. Однако, если $m_2 = m_3 + 1$, тогда $\Delta_1 = 0$, то есть эта конфигурация является вырожденной относительно взаимодействия ближайших соседних вакансий и основной вклад в Δ дает взаимодействие вторых соседей, так что $\Delta \simeq \Delta_2$. Таким образом ясно, что спектр энергии показывает иерархию “двухуровневых систем” с энергетическими щелями распределенными около $\Delta_1, \Delta_2, \dots$. Аналогично, для каждой конфигурации i с энергией E_i существует множество других конфигураций i' с энергией $E_{i'}$, где каждое $\{j_l^{(i')}\}$ отличается от $\{j_l^{(i)}\}$ только локально на одном или большем числе членов и переход $i \rightarrow i'$ представляет возбуждение двухуровневой системы с энергией возбуждения $\Delta^{(i,i')} = E_i - E_{i'}$. Заметим, что более детальное исследование [527] показывает скейлинговое поведение функции распределения $\Delta^{(i,i')}$.

Теперь давайте коротко обсудим плотность конфигурационных возбуждений для различных концентраций θ . Если $\theta = \theta_1 \equiv m_0/(m_0+1)$ с $m_0 \geq 2$, основное состояние ФК цепи при $T = 0$ описывается последовательностью $m_k = m_0$ для всех k . Так, при низких температурах, когда $k_B T \ll \Delta_1$, большинство возбуждений имеет энергетическую щель $\Delta \simeq \Delta_1$, и только малая фракция конфигурационных возбуждений с статистическим весом $\sim \exp(-\Delta_1/k_B T)$ приводит к энергетической щели $\Delta \simeq \Delta_2$. С другой стороны, если $\theta = \theta_2 \equiv (2m_0+1)/(2m_0+3)$, когда $T = 0$ ОС имеет форму $\dots m_0; m_0 + 1; m_0; m_0 + 1; \dots$, большинство возбуждений имеет $\Delta \simeq \Delta_2$, в то время как только небольшая фракция приводит к щели $\Delta \simeq \Delta_1$.

Энергия основного состояния при ненулевой температуре $T \neq 0$ для двухуровневой системы с щелью Δ может быть оценена как $E(T) \propto \Delta \exp(-\Delta/k_B T)/[1 + \exp(-\Delta/k_B T)]$. Это приводит к теплоемкости ФК цепи

$$c(T) \propto k_B \left(\frac{\Delta}{k_B T} \right)^2 \frac{\exp(\Delta/k_B T)}{[1 + \exp(\Delta/k_B T)]^2}, \quad (6.58)$$

которая имеет максимум при $T \simeq 0.4 \Delta/k_B$. Из-за тонкой структуры спектра возбуждений модели ФК, функция $c(T)$ должна состоять из множества пиков на температурах соответствующих щелям $\Delta_1, \Delta_2, \dots$. Интенсивность этих пиков будет, однако, сильно зависеть от концентрации θ . Действительно, с изменением θ интенсивность пика связанная с щелью Δ_1 имеет максимум при $\theta = \theta_1$, $\theta = \theta'_1 \equiv (m_0 + 1)/(m_0 + 2)$, $\dots$, в то время как ее минимумы должны достигаться при $\theta = \theta_2$, $\theta = \theta'_2 \equiv (2m_0 + 3)/(2m_0 + 5)$, $\dots$. С другой стороны, интенсивность пика соответствующего щели Δ_2 , будет иметь максимум при $\theta = \theta_2$, θ'_2 , $\dots$, и минимум при $\theta = \theta_1$, θ'_1 , $\dots$.

Для аналитического вычисления термодинамических характеристик мы нуждаемся в дальнейшем упрощении модели Изинга (6.45). А именно, мы учтем только конечное число взаимодействующих дырок (например, только ближайших соседей) и, кроме того, ограничим возможные значения m_k (например, при $\theta = \theta_1$ мы можем допустить, что m_k принимает только значения m_0 и $m_0 \pm 1$). Длинные, но прямые вычисления [531] подтверждают данную выше интуитивную картину для теплоемкости $c(T, \theta)$.

Волет с соавторами [528, 529] провели строгое вычисление спектра низко-энергетических возбуждений, теплоемкости и иерархии “плавления” ФК цепи с несоразмерной концентрацией.

Описанное поведение теплоемкости $c(T, \theta)$ наблюдалось экспериментально при изучении ионного проводника холландита (hollandite) $K_{2\rho}Mg_\rho Ti_{\delta-\rho}O_{16}$ [532]. Отметим, что в эксперименте время измерения должно быть достаточно большим, для того чтобы переходы через потенциальные барьеры имели ненулевую вероятность и чтобы можно было получить температурное поведение $c(T)$ от вклада фононов.

В заключение заметим, что переход (6.53) может быть рассмотрен как рождение (супер-) кинк-антикинк-пары которая оказывается сильно пинингованной высокоамплитудным ПН потенциалом, так что значение Δ_n соответствует удвоенной энергии суперкинка n -го порядка. При таком подходе пики теплоемкости $c(T, \theta)$ можно интерпретировать как вклады от рождения кинк-антикинк-пар. Как мы увидим далее в параграфе 6.5.2, этот подход остается полезным и в пределе сильного взаимодействия $g \gg 1$. В последнем случае, однако, тонкая структура $c(T)$ исчезает в силу исчезновения ПН барьеров.

6.4 Предел сильной связи: Газ квазичастиц

В пределе сильной связи, $g \gg 1$, модель ФК сводится к модели СГ с малыми поправками вследствие эффектов дискретности. Оставив обсуждение эффектов дискретности для параграфа 6.4.4, давайте начнем с чистой модели СГ. Для СГ гамильтониана в распределении возбуждений можно, используя обратную задачу рассеяния, точно разделить вклады соответствующие элементарным возбуждениям (фононам, бризерам и кинкам). Следовательно, любое возбужденное состояние можно рассмотреть как суперпозицию N_{ph} линейных фононов, N_{br} бризеров, N_k кинков и $N_{\bar{k}}$ антикинков (здесь под кинками мы подразумеваем кинки на фоне структуры с $\theta = 1$, естественной для случая СГ). Столкновение этих квазичастиц является “упругим”, то есть, их индивидуальные характеристики, такие как форма, энергия и импульс не меняются. Таким образом, здесь разумно вычислять термодинамические потенциалы предположив существование “идеального газа” невзаимодействующих квазичастиц, которые принимают равноправное участие в функции распределения.

Введя формально химические потенциалы μ_k , $\mu_{\bar{k}}$ и μ_B (индекс B соответствует бризерам и/или фононам – см. далее параграф 6.4.1), мы можем вычислить большую каноническую сумму Ξ для ФК цепочки со “свободным концом” как

$$\begin{aligned} \tilde{\Xi}(T, \mu_k, \mu_{\bar{k}}, \mu_B) &= \sum_{N_k, N_{\bar{k}}, N_B} \frac{1}{N_k! N_{\bar{k}}! N_B!} \\ \exp[\beta(\mu_k N_k + \mu_{\bar{k}} N_{\bar{k}} + \mu_B N_B)] &\int d\Gamma \exp[-\beta E(N_k, N_{\bar{k}}, N_B)], \end{aligned} \quad (6.59)$$

где интегрирование $d\Gamma$ происходит по всем независимым степеням свободы системы в фазовом пространстве, а $E(N_k, N_{\bar{k}}, N_B)$ – сумма энергий всех составляющих мод. Соответствующий термодинамический потенциал

$$\tilde{J}(T, \mu_k, \mu_{\bar{k}}, \mu_B) = -k_B T \ln \tilde{\Xi}(T, \mu_k, \mu_{\bar{k}}, \mu_B), \quad (6.60)$$

позволяет вычислить средние значения числа возбужденных квазичастиц,

$$\langle N_b \rangle = - \left(\frac{\partial \tilde{J}}{\partial \mu_b} \right)_T, \quad b = k, \bar{k}, \text{ or } B. \quad (6.61)$$

Тепловое равновесие в системе достигается за счет рождения и аннигиляции кинк-антикинк-пар. Этот процесс может быть рассмотрен как “химическая реакция” $k + \bar{k} \leftrightarrow B$, условие равновесия которой задается уравнением $\mu_k + \mu_{\bar{k}} = \mu_B$ [159]. Так как мы не можем контролировать число бризеров и фононов, то мы должны положить $\mu_B = 0$. Таким образом, на конечном шаге вычислений мы должны положить

$$\mu_k = -\mu_{\bar{k}}, \quad (6.62)$$

и термодинамический потенциал станет только функцией от T и $\mu_w \equiv \mu_k$,

$$J(T, \mu_w) = \tilde{J}(T, \mu_w, -\mu_w, 0). \quad (6.63)$$

Значение μ_w соответствует общему топологическому заряду $N_w = N_{\bar{k}} - N_k$,

$$\langle N_w \rangle = \left(\frac{\partial J}{\partial \mu_w} \right)_T. \quad (6.64)$$

Заметим, что μ_w описывает преобладание кинков над антикинками если $\mu_w > 0$ и наоборот если $\mu_w < 0$, а при $\mu_w = 0$ среднее значение $\langle N_w \rangle = 0$.

Фононный вклад в J был вычислен выше, для фононов $\int d\Gamma_{\text{ph}} = \int_{-\pi}^{+\pi} d\kappa/2\pi$, $E_{\text{ph}} = \hbar\omega(\kappa)$, и $J_B = F_B$, так как $\mu_B = 0$. Здесь F_B задается уравнениями (6.19) или (6.26).

Теперь давайте рассмотрим вклад кинков в термодинамические характеристики. Каждый кинк в конфигурационном пространстве имеет одну степень свободы – голдстоуновскую моду. Таким образом, интегрирование в фазовом пространстве нужно сделать по координате кинка X_k и по его импульсу P_k ,

$$d\Gamma_k = \frac{dX_k dP_k}{2\pi\hbar}. \quad (6.65)$$

Полная энергия кинка в нерелятивистском случае равна

$$E_k = \varepsilon_k + P_k^2/2m, \quad (6.66)$$

где ε_k – энергия покоя кинка, а m – его масса. Интегрирование по X_k в уравнении (6.59) позволяет получить множитель L , полную длину цепи, а интегрирование по P_k дает множитель $z = (mk_B T/2\pi\hbar^2)^{1/2} \exp(-\beta\varepsilon_k)$. Таким образом, после прямых вычислений мы из уравнений (6.59) – (6.65) получим вклад кинков:

$$J_s = -k_B T \langle N_{\text{tot}} \rangle, \quad (6.67)$$

$$F_s = -(k_B T \langle N_{\text{tot}} \rangle + \mu_w \langle N_w \rangle). \quad (6.68)$$

Концентрация кинков в уравнениях (6.67), (6.68) определяется соотношениями

$$\langle n_k \rangle = \langle n_{\text{pair}} \rangle \exp(\beta\mu_w), \quad (6.69)$$

$$\langle n_{\bar{k}} \rangle = \langle n_{\text{pair}} \rangle \exp(-\beta\mu_w), \quad (6.70)$$

$$\langle n_{\text{tot}} \rangle = 2\langle n_{\text{pair}} \rangle \cosh(\beta\mu_w), \quad (6.71)$$

$$\langle n_w \rangle = -2\langle n_{\text{pair}} \rangle \sinh(\beta\mu_w). \quad (6.72)$$

Важно отметить, что если до усреднения мы имели $N = 2N + |N_w|$, то после усреднения мы будем иметь соотношение [159]

$$\langle n_{\text{tot}} \rangle^2 = \langle 2n_{\text{pair}} \rangle^2 + \langle n_w \rangle^2. \quad (6.73)$$

Используя связь N_w с длиной цепи L ,

$$L = a_s(N + \langle N_w \rangle), \quad (6.74)$$

мы можем ввести давление Π как

$$\Pi = - \left(\frac{\partial F}{\partial L} \right)_{T,N} = \frac{\mu_w}{a_s}. \quad (6.75)$$

Выше было упомянуто, что кинки дают основной вклад в восприимчивость χ , определенную уравнением (6.18). Действительно, из уравнений (6.67) – (6.75) следует, что

$$\chi = a_s^2 \langle n \rangle \langle n_{\text{tot}} \rangle = \frac{\langle n_{\text{tot}} \rangle}{\langle n \rangle} \frac{1}{(1 + \tilde{w})^2}. \quad (6.76)$$

Использованный выше наивный подход приводит к плотности термически возбужденных кинк-антикиновых пар, определенной уравнением

$$\langle n_{\text{pair}}^{(0)} \rangle \equiv z = \left(\frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{1/2} e^{-\beta\varepsilon_k} \quad (6.77)$$

(мы допустили, что кинки и антикинки имеют одинаковые параметры как в стандартной модели ФК с $a_{\min} = a_s$). Заметим, что все полученные результаты, уравнения (6.67) – (6.76), остаются верными и при строгом подходе к задаче, нужно только подправить одно последнее уравнение (6.77).

Для ФК цепи с “фиксированной плотностью”, для которой число N_w фиксируется периодическими граничными условиями, мы должны выбрать μ_w так чтобы $\langle N_w \rangle = N_w$. Ясно, что для нулевого параметра соразмерности, $N_w = 0$, мы должны положить $\mu_w = 0$. Если $N_w \neq 0$, то удобно ввести температуру T^* при которой плотность термически возбужденных кинков равна плотности внешних кинков, $\langle n_{\text{pair}}(T^*) \rangle = |n_w|$. Тогда, из уравнения (6.72) следует, что на низких температурах, когда $\langle n_{\text{pair}} \rangle \ll |n_w|$, $|\mu_w|$ стремится к энергии рождения кинка ε_k (смотри, однако, далее уравнение (6.97)),

$$\mu_w \simeq -\varepsilon_k \operatorname{sgn}(n_w) \left\{ 1 + \frac{k_B T}{\varepsilon_k} \ln \frac{|n_w| e^{-\beta \varepsilon_k}}{\langle n_{\text{pair}} \rangle} \right\}, \quad T \ll T^*, \quad (6.78)$$

в то время как при высоких температурах, $T \gg T^*$ (но $k_B T \ll \varepsilon_k$), когда $\langle n_{\text{pair}} \rangle \gg |n_w|$, $|\mu_w|$ близка к нулю,

$$\mu_w \simeq -k_B T n_w / 2 \langle n_{\text{pair}} \rangle. \quad (6.79)$$

Поэтому, как впервые заметили Currie *et al.* [159],

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \lim_{N_w \rightarrow 0} \mu_w \neq \lim_{N_w \rightarrow 0} \lim_{T \rightarrow 0} \mu_w. \quad (6.80)$$

Аналогично мы можем вычислить вклад бризеров в термодинамические функции, приняв во внимание, что каждый бризер в конфигурационном пространстве имеет две степени свободы, одна соответствует его свободному движению как одного целого, а другая описывает внутренние колебания бризера с частотой ω_{br} . Вспомним, что низкочастотный бризер, $\omega_{\text{br}} \rightarrow 0$, может быть рассмотрен как связанная (виртуальная) кинк-антикинковая пара, в то время как высокочастотный бризер, $\omega_{\text{br}} \rightarrow \omega_0$, может быть интерпретирован как пара фононов связанная из-за эффектов нелинейности.

Использованный выше простой подход впервые предложили Крумхансл и Шриффер [517]. Этот подход основан на предположении, что система в конфигурационном пространстве имеет

$$N_\Sigma = N_{\text{ph}} + 2N_{\text{br}} + N_k + N_{\bar{k}} \quad (6.81)$$

степеней свободы, или что состояние системы описывается точкой фазового пространства размерности $2N_\Sigma$. Очевидно, однако, что в статистической механике фазовое пространство системы из N частиц должно иметь размерность $2N$. Поэтому должно выполняться равенство $N_\Sigma = N$. Эту проблему первыми поставили и решили Кюри с соавторами [159].

6.4.1 Бризеры и разделение фазового пространства

В то время как нормальные моды линейной системы могут быть описаны как независимые степени свободы, то нелинейные моды не являются независимыми. Следовательно, $2N$ -мерное фазовое пространство должно быть разделено между различными нелинейными модами, а элемент фазового пространства $d\Gamma$ в уравнении (6.59) нужно взять в форме

$$d\Gamma = \left(\prod_k^{N_{\text{tot}}} d\Gamma_k \right) \left(\prod_B^{N_B} d\Gamma_B \right) \Omega(\{\xi_i\}), \quad (6.82)$$

где функция Ω представляет ограничение на фазовое пространство доступное для квазичастиц из-за их “взаимодействия”. Хотя столкновения квазичастиц в случае уравнения СГ происходят “упруго”, фазы (то есть координаты) квазичастиц при столкновении сдвигаются. Именно этот “фазовый-сдвиг” взаимодействия обеспечивает механизм разделения степеней свободы среди элементарных возбуждений нелинейных систем. В качестве примера давайте рассмотрим, следуя Кюри с соавторами [533] и Труллингеру [534], ФК цепочку длины L , на которую наложены периодические граничные условия. В отсутствии кинков, допустимые волновые вектора k определяются условием $Lk_p = 2\pi p$ ($p = 0, \pm 1, \dots, N/2$), а плотность фононных состояний $\rho_0(k) = L/2\pi$. В присутствии единичного стационарного кинка или антикинка волновая форма фонона искажается вблизи кинка, в результате этого происходит “фазовый сдвиг” фонона

$$\delta_0(k) = \pi k / |k| - 2 \tan^{-1}(kd). \quad (6.83)$$

Для кинкадвигающегося со скоростью v , фазовый сдвиг фонона может быть получен из уравнения (6.83) при помощи преобразования Лоренца,

$$\delta(k; v) = \delta_0(k'), \quad k' = \gamma \left[k - (v\omega_0/c^2) \sqrt{1 + k^2 d^2} \right], \quad (6.84)$$

где $\gamma = 1/\sqrt{1-v^2/c^2}$ и $c = \omega_0 d$. В присутствии кинка допустимые значения волновых векторов k определяется уравнением

$$Lk_p + \delta(k_p; v) = 2\pi p, \quad (6.85)$$

а плотность фононных состояний

$$\rho(k) = \frac{dp}{dk} = \rho_0(k) + \Delta\rho(k, v), \quad \Delta\rho(k, v) = \frac{1}{2\pi} \frac{\partial \delta(k; v)}{\partial k}. \quad (6.86)$$

Заметим, что в случае СГ $\int_{-\infty}^{+\infty} dk \Delta\rho(k, v) = -1$. Таким образом, кинк “захватывает” одно фононное состояние только из-за самого своего существования и преобразует его в трансляционную (голдстоуновскую) моду кинка.

Аналогично, одиночный бризер “захватывает” две фононные моды. Общее выражение для ограничивающего множителя Ω через соответствующие фазовые сдвиги было дано Сасаки [535]. Однако, этот подход встречается со значительными трудностями, известными как бризерная проблема [535]–[541]. А именно, в то время как число возбужденных кинков мало при низких температурах и, поэтому, множитель Ω близок к 1, то число возбужденных бризеров имеет тот же порядок, что и число фононов ($N_{\text{бр}} \sim \frac{1}{2}N$, $N_{\text{рн}} \sim N$) даже при $T \rightarrow 0$, так как эти два типа возбуждений рождаются без пороговой энергии. Следовательно, разделение фазового пространства между фононами и бризерами не является простой задачей, и это надо учитывать даже в нулевом приближении. Другими словами, фононы и бризеры не могут быть рассмотрены одновременно как Максвелл-Больцмановский газ независимых частиц. Физический смысл “сильного взаимодействия” между бризерами и фононами состоит в том что “размер” бризера стремится к бесконечности при $\omega_{\text{бр}} \rightarrow 0$.

Хотя в принципе можно развить полную “фонон-бризер-кинковую” программу, но более удобно взять в качестве нулевого приближения ансамбль фононов и кинков (и тем самым вообще проигнорировать бризеры), или “бризер-кинковый” ансамбль (то есть проигнорировать фононы). Нужно подчеркнуть, что все эти подходы приводят к одному и тому же окончательному результату. Подход фонон-кинкового газа является более удобным для классической статистической механики. Он был использован в большинстве работ посвященных этой задаче. Здесь в первом приближении фононы рассматриваются как невзаимодействующие квазичастицы (гармонические фононы). Анггармоничные коррекции проводятся при помощи стандартной теории возмущения фононов. Коррекции приводят к дополнительным членам в термодинамических потенциалах порядка T и выше [538].

Термодинамика больцмановского газа бризеров и кинков логически вытекает из Бете-анзаца формулировки квантовой СГ системе. Этот подход был использован Теодоракополусом [539, 540] и Сасаки [535]. Заметим, что фононы автоматически включаются в этот подход, так как квантовое состояние бризера при малой энергии совпадают с ренормализованным фононом. Ниже мы более детально рассмотрим кинк-фононный подход.

6.4.2 Кинк-фононное взаимодействие

Разбиение фазового пространства между фононами и кинками можно провести двумя способами. Первый метод, предложенный Томбулисом [542], использует каноническое преобразование из оригинальных канонических переменных к новому множеству, в котором координаты кинков X_k и их импульсов P_k (сопряженных к X_k) вводятся как канонические переменные. Для каждого кинка мы должны наложить два ограничения Дирака с целью сохранить без изменения размерность фазового пространства. Этот подход был использован, например, Мияшита и Маки [543, 544], Факума и Такада [545]. Мы, однако, будем следовать более простому и “прозрачному” методу первых работ посвященных этой задаче [533, 534].

Как было показано выше, присутствие кинка движущегося со скоростью v изменяет плотность состояний фононов на величину $\Delta\rho(k; v)$ данную уравнением (6.86). Это изменение приводит к вкладу в свободную энергию, которая равна [533, 534]

$$\begin{aligned} \Delta F(v) &= k_B T \int_{-\infty}^{+\infty} dk \Delta\rho(k; v) \ln[\beta \hbar \omega(k)] \\ &= -k_B T \ln[(1 + \gamma)\beta \hbar \omega_0], \end{aligned} \quad (6.87)$$

где $\gamma = 1/\sqrt{1-v^2/c^2}$. Каждый кинк и антикинк независимо вносят вклад в изменение плотности фононных состояний, так как фазовые сдвиги в СГ случае аддитивны. Таким образом, полное изменение свободной энергии в присутствии N_{tot} кинков и антикинок можно представить как

$$\Delta F_N(v_1, v_2, \dots, v_{N_{\text{tot}}}) = \sum_{j=1}^{N_{\text{tot}}} \Delta F(v_j). \quad (6.88)$$

Возвращаясь к вычислению основной канонической функции разбиения (6.59), мы заметим, что фононная плотность зависит от числа кинков и от их скоростей. Следовательно, до того как мы сможем проинтегрировать по импульсам кинков, мы должны вначале проинтегрировать по фононным степеням свободы. После этого интегрирования функция Ξ примет форму

$$\Xi = e^{-\beta F_{\text{ph}}^{(0)}} \sum_{N_k=0}^{\infty} \sum_{N_{\bar{k}}=0}^{\infty} \frac{e^{\beta(\mu_k N_k + \mu_{\bar{k}} N_{\bar{k}})}}{N_k! N_{\bar{k}}!} \int \prod_{k=0}^{N_k} \frac{dX_k dP_k}{2\pi\hbar} \prod_{\bar{k}=0}^{N_{\bar{k}}} \frac{dX_{\bar{k}} dP_{\bar{k}}}{2\pi\hbar} e^{\Theta}$$

где

$$\Theta = \exp \left\{ -\beta [E_k(P_k)N_k + E_{\bar{k}}(P_{\bar{k}})N_{\bar{k}}] - \beta \Delta F_{N_k+N_{\bar{k}}} \right\},$$

где $F_{\text{ph}}^{(0)}$ – невозмущенная свободная энергия фононов при отсутствии кинков, данная уравнением (6.19). В силу аддитивной структуры функции $\Delta F_{N_{\text{tot}}}$, уравнение (6.88), мы можем включить вклады $\Delta F(v_j)$ с энергиями кинков $E_k(P_j)$, введя “ренормализованную” энергию кинка

$$E_k^*(P) = E_k(P) + \Delta F(v). \quad (6.89)$$

Напомним, что в СГ случае

$$E_k(P) = E_{\bar{k}}(P) = \varepsilon_k \gamma \quad (6.90)$$

и

$$P = mv\gamma. \quad (6.91)$$

Кюри с соавторами [533] предложили интерпретировать значение $\Delta F(v)$ как “энергию покоя” кинка аналогично свободной энергии электрона в кристалле, которая появляется в теории полярона из-за фононной шубы электронов.

Теперь, повторяя сделанные выше вычисления, мы опять приходим к уравнениям (6.67) – (6.76) за исключением только того, что интегрирование по импульсам кинков дает теперь множитель

$$z \equiv \langle n_{\text{pair}} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dP}{2\pi\hbar} \exp[-\beta E_k^*(P)]. \quad (6.92)$$

Этот интеграл можно выразить через модифицированные функции Бесселя [534]. В пределе низких температур, $k_B T \ll \varepsilon_k$, уравнение (6.92) приводит к результату

$$\langle n_{\text{pair}} \rangle \simeq \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\sqrt{\beta \varepsilon_k}}{d} \left[1 + O\left(\frac{1}{\beta \varepsilon_k}\right) \right] e^{-\beta \varepsilon_k}, \quad (6.93)$$

где малая поправка $O(\tau) = \frac{5}{8}\tau + \frac{21}{128}\tau^2 + \dots$ [540, 543, 544]. Сравнивая уравнение (6.93) с уравнением (6.77), мы видим, что фонон-кинковое разделение фазового пространства уменьшает число термически возбужденных кинк-антикинкковых пар на множитель $2\hbar\omega_0/k_B T \ll 1$ (заметим, что классическая механика применима только при $\hbar\omega_0 \ll k_B T$).

Таким образом, термодинамические функции принимают форму:

$$J = F_{\text{ph}}^{(0)} - k_B T \langle N_{\text{tot}} \rangle, \quad (6.94)$$

$$F = F_{\text{ph}}^{(0)} - [k_B T \langle N_{\text{tot}} \rangle + \mu_w \langle N_w \rangle], \quad (6.95)$$

$$E = k_B T (N - \langle N_{\text{tot}} \rangle) + \left(\varepsilon_k + \frac{1}{2} k_B T \right) \langle N_{\text{tot}} \rangle + \mu_w \left[\beta \mu_w \langle N_{\text{tot}} \rangle + \left(\beta \varepsilon_k - \frac{1}{2} \right) \langle N_w \rangle \right]. \quad (6.96)$$

Два первых члена в уравнении (6.96) будут иметь простую интерпретацию [159] если мы вспомним, что каждый кинк убирает одну фононную моду и, что каждый кинк имеет энергию покоя (потенциальную энергию) ε_k и трансляционную (кинетическую) энергию $\frac{1}{2} k_B T$, в то время как последний член в уравнении (6.96) приводит к малым поправкам при $\langle n_w \rangle \ll \langle n_{\text{pair}} \rangle$ так же как и при $\langle n_{\text{pair}} \rangle \ll \langle n_w \rangle$.

Ясно, что это описание справедливо в случае когда полное число кинков мало, т.е. $\langle N_{\text{tot}} \rangle \ll N$, так что для кинков мы можем проигнорировать эффекты связанные с разделением фазового пространства. Для выполнения этого условия, нужно чтобы

$$\beta (\varepsilon_k - |\mu_w|) \ll 1, \quad (6.97)$$

то есть, химический потенциал μ_w должен иметь величину меньше энергии рождения кинка и не приближающуюся к ней слишком близко. Когда $|\mu_w| \geq \varepsilon_k$, то уже нужно принять во внимание взаимодействие кинков между собой, которое отвечает за конечность плотности кинков.

6.4.3 Кинк-кинковое взаимодействие

Когда полное число кинков возрастает (с ростом температуры T или $|\mu_w|$), мы должны учесть разделение фазового пространства между кинками из-за фазовых сдвигов при их столкновениях. Напомним (см., например, параграф 1.2) что положение кинка имеющего скорость v_1 сдвигается на величину

$$\delta(v_1, v_2) = \text{sgn}(v_1 - v_2) \frac{d}{\gamma_1} \ln \frac{\gamma_1 \gamma_2 (1 - v_1 v_2 / c^2) + 1}{\gamma_1 \gamma_2 (1 - v_1 v_2 / c^2) - 1}, \quad \gamma_j = \left(1 - \frac{v_j^2}{c^2}\right)^{-1/2} \quad (6.98)$$

после столкновения с кинком имеющим скорость v_2 (эффект этого взаимодействия не зависит от того являются ли взаимодействующие “частицы” кинками или антикинками). В нерелятивистском пределе ($|v_1|, |v_2| \ll c$) мы имеем $\delta(v_1, v_2) = -\delta(v_2, v_1)$; траектории кинков при двух-кинковом столкновении схематически показаны на рис. 6.7. Положение кинков X_j в импульс их наибольшего сближения определить трудно. Сасаки [546, 547] предложили принять, что кинки движутся с постоянной скоростью до их контакта в момент времени $t = t_c$ (см. рис. 6.7), так как если они были жесткими стержнями длины

$$\Delta(v_1, v_2) = |\delta(v_1, v_2)| = 2d \ln(2c/|v_1 - v_2|). \quad (6.99)$$

Тогда расстояние между кинками будет ограничено “длиной” стержня $\Delta(v_1, v_2)$, а возможные значения координат кинков будут ограничены неравенством $|X_1 - X_2| > \Delta(v_1, v_2)$. В силу этого множитель Ω в уравнении (6.82) будет задаваться выражением

$$\Omega(X_1, X_2, P_1, P_2) = \Theta(|X_1 - X_2| - \Delta(v_1, v_2)), \quad (6.100)$$

где $\Theta(x)$ ступенчатая функция Хевисайда. Сасаки [546, 547] показал, что кинк-кинковое взаимодействие уменьшает число термически возбужденных кинков,

$$\langle n_{\text{pair}} \rangle = \langle n_{\text{pair}} \rangle_0 (1 - 4\bar{\Delta} \langle n_{\text{pair}} \rangle_0), \quad (6.101)$$

где $\langle n_{\text{pair}} \rangle_0$ – концентрация пар в отсутствии взаимодействия кинков, см. уравнение (6.93), а

$$\bar{\Delta} = d \ln(4\gamma_0 \varepsilon_k / k_B T) + O(k_B T / \varepsilon_k), \quad (6.102)$$

$\gamma_0 = 1.781\dots$ – постоянная Эйлера. Аналогично, абсолютное значение вклада кинков в свободную энергию тоже уменьшается,

$$F_s = -k_B T \langle N_{\text{tot}} \rangle_0 (1 - 2\bar{\Delta} \langle n_{\text{pair}} \rangle_0), \quad (6.103)$$

где мы предположили, что $\mu_w = 0$. Ясно, что столкновения более высоких порядков приводят к вкладам $\propto \exp(-3\beta \varepsilon_k)$ и меньшим.

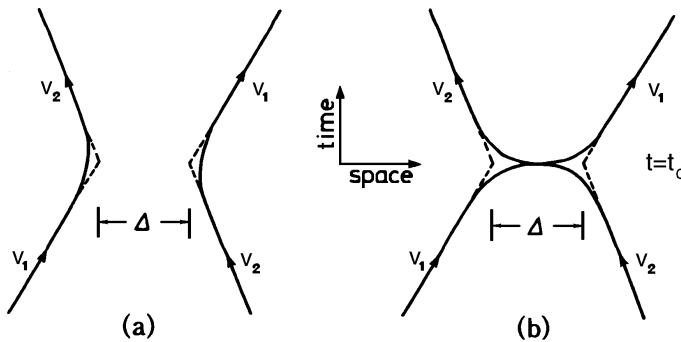


Рис. 6.7. Траектории двух кинков (а), кинка и антикинка (b) при двухчастичном столкновении. [519].

6.4.4 Эффекты дискретности

Хотя точное разделение энергии возбужденного состояния на вклады “невзаимодействующих” фононов, бризеров и кинков возможно только для интегрируемых систем таких как СГ система, но философия конфигурационного пространства остается не менее полезной и применимой и в более общих случаях. В частности, Трулингер и Сасаки [548], и Виллис и Буш [549] использовали подход идеального газа кинков при исследовании эффектов дискретности в модели ФК.

Первое, в дискретной ФК цепочке свободное движение СГ кинка заменяется движением кинка на периодическом Пейерлс-Набарровским потенциалом рельефе амплитуды ε_{PN} . Поэтому энергия кинка E_k теперь зависит не только от его скорости v , но также от положения его центра X ,

$$E_k(X, v) \simeq \varepsilon_k^{(FK)} + \frac{1}{2} \varepsilon_{PN} (1 - \cos X) + \frac{1}{2} m^{(FK)}(X) v^2, \quad (6.104)$$

где $\varepsilon_k^{(FK)}$ – энергия покоя ФК кинка на дне ямы ПН потенциала, $m^{(FK)}(X)$ – эффективная масса кинка. Было использовано нерелятивистское приближение ($|v| \ll c$). Отклонения $\varepsilon_k^{(FK)}$ и $m^{(FK)}$ от СГ значений $\varepsilon_k^{(SG)}$ и $m^{(SG)}$ были рассмотрены ранее в параграфе 3.1. Заметим, что $m^{(FK)}(X)$ очень слабо отличается от $m^{(SG)}$ даже при $g \sim 1$ [549].

Второе, при рассмотрении разделения фонон-кинкового фазового пространства мы должны использовать закон дисперсии фононов для дискретной ФК цепи, $\omega^2(k) = \omega_0^2 + 2g[1 - \cos(ka_s)]$, где $|k| \leq \pi/a_s$, также кинк-фононный сдвиг $\delta^{(SG)}(k; v)$ должен быть заменен на фазовый сдвиг в дискретной ФК цепи, $\delta^{(FK)}(k; v)$ [166]. Таким образом, “внутренняя энергия” кинка теперь будет определяться интегралом

$$\Delta F(v) = k_B T \int_{-\pi/a_s}^{+\pi/a_s} \frac{dk}{2\pi} \frac{\partial \delta^{(FK)}(k; v)}{\partial k} \ln[\beta \hbar \omega(k)] \quad (6.105)$$

вместо уравнения (6.87). В результате этого, все ранее полученные выражения остаются правильными, за исключением множителя z , уравнение (6.92), который теперь должен быть вычислен как интеграл

$$z \equiv \langle n_{\text{pair}} \rangle = \frac{1}{a_s} \int_0^{a_s} \frac{dX}{2\pi \hbar} m^{(FK)}(X) \int_{-\infty}^{+\infty} dv \exp \{ -\beta [E_k(X, v) + \Delta F(v)] \}. \quad (6.106)$$

Используя уравнения (6.104) и (6.105), мы получим

$$\langle n_{\text{pair}} \rangle^{(FK)} = \langle n_{\text{pair}} \rangle^{(SG)} I_0 \left(\frac{\beta \varepsilon_{PN}}{2} \right) \exp \left[\beta \left(\varepsilon_k^{(SG)} - \varepsilon_k^{(FK)} \right) \right] \left(f^{(FK)} / f^{(SG)} \right),$$

где I_0 – модифицированная функция Бесселя, а последнее отношение, $f^{(FK)} / f^{(SG)}$, описывает изменения обусловленные эффектами дискретности во “внутренней энергии” кинка, уравнение (6.105). Компьютерное моделирование [549] показывает, что эффекты дискретности приводят к возрастанию $\langle n_{\text{pair}} \rangle$, главным образом из-за уменьшения энергии рождения кинка, $\varepsilon_k^{(FK)} < \varepsilon_k^{(SG)}$.

Для заключения дискуссии о методе газа квазичастиц заметим, что результаты для случая низких температур, полученные этим методом, в точности совпадают с результатами точных вычислений, например, метода трансфер-интеграла. Более того, отметим, что если метод трансфер-интеграла применим только для равновесной классической механикой одномерных систем, то феноменологический метод газа квазичастиц допускает рассмотрение динамического поведения системы в рамках двухмерной версии модели, позволяет учитывать квантовые эффекты, и т.д.

6.5 Статистическая механика ФК цепи

6.5.1 Метод трансфер-интеграла

Простейший способ формально точного описания равновесного состояния классической одномерной системы предложил Скалапино с соавторами [550], это метод трансфер-интеграла (ТИ). Идеей метода является сведение вычисления функции разбиения к решению задачи на собственные значения некоторого интегрального уравнения. К ФК модели эту идею впервые применили Гупта и Сутурланд [551] и затем развили ее дальше в целой серии работ (см., например, [159, 496, 520, 552, 553]).

Для стандартной ФК модели с гамильтонианом

$$H = \sum_{l=1}^N \left[\frac{1}{2} \dot{u}_l^2 + \frac{g}{2} (u_{l+1} - u_l)^2 + V_{\text{sub}}(u_l) \right], \quad (6.107)$$

где $u_l = x_l - la_s$, канонический ансамбль определяется статистической суммой ($m_a = 1$)

$$\mathcal{Z}(T, L, N) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^N} \int_{-\infty}^{+\infty} d\dot{u}_1 \int_{-\infty}^{+\infty} d\dot{u}_2 \dots \int_{-\infty}^{+\infty} d\dot{u}_N \int_0^{a_s} du_1 \int_{-\infty}^{+\infty} du_2 \dots \int_{-\infty}^{+\infty} du_N e^{-\beta H}. \quad (6.108)$$

Здесь одна из переменных должна быть ограничена конечной областью значений, и мы ограничим значения u_1 интервалом $(0, a_s)$. ФК цепь с “конечной плотностью” должна удовлетворять периодическим граничным условиям,

$$u_{N+l} = u_l + \Delta L, \quad (6.109)$$

где $\Delta L = N_w a_s$. Таким образом, $\mathcal{Z}$ разделяется на конфигурационную часть $\mathcal{Z}_x$ и сопряженную импульсную часть $\mathcal{Z}_{\dot{x}}$,

$$\mathcal{Z} = \mathcal{Z}_{\dot{x}} \mathcal{Z}_x, \quad \mathcal{Z}_{\dot{x}} = \left(\frac{m_a k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{N/2}. \quad (6.110)$$

Введя эффективную матрицу передачи K ,

$$K(u, u') = \sqrt{\frac{\beta g}{2\pi}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \beta [V_{\text{sub}}(u) + V_{\text{sub}}(u') + g(u - u')^2] \right\}, \quad (6.111)$$

и учитывая граничное условие (6.109) с помощью δ -функции Дирака, конфигурационную функцию разбиения можно переписать в форме

$$\mathcal{Z}_x(T, L, N) = \left(\frac{2\pi}{\beta g} \right)^{N/2} \int_0^{a_s} du_1 \sum_{m=2}^{N+1} \int_{-\infty}^{+\infty} du_m \delta(u_{N+1} - u_1 - \Delta L) \sum_{m=1}^N K(u_m, u_{m+1}). \quad (6.112)$$

Теперь давайте введем “правосторонние” собственные функции $\psi_\alpha(u)$ и собственные значения λ_α матрицы K ,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} K(u, u') \psi_\alpha(u') du' = \lambda_\alpha \psi_\alpha(u). \quad (6.113)$$

Аналогично, мы можем определить “левосторонние” собственные функции $\psi_\alpha^*(u)$. Теория Штурма-Лиувилля гарантирует, что собственные функции $\psi_\alpha(u)$ составляют полный орто-нормальный набор в интервале $u \in (-\infty, +\infty)$. Подставляя условие полноты

$$\sum_{\alpha} \psi_\alpha^*(u) \psi_\alpha(u') = \delta(u - u') \quad (6.114)$$

в уравнение (6.112) вместо δ -функции и используя повторно уравнение (6.113), мы в конце получим

$$\mathcal{Z}_x(T, L, N) = \left(\frac{2\pi}{\beta g} \right)^{N/2} \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha}^N \int_0^{a_s} du_1 \psi_{\alpha}^*(u_1 + \Delta L) \psi_{\alpha}(u_1). \quad (6.115)$$

Уравнение на собственные значения (6.113) является однородным интегральным уравнением Фредгольма второго типа с симметричным ядром. В силу периодичности потенциала $V_{\text{sub}}(u)$, матрица преобразования $K(u, u')$ не изменится если к u и u' добавить любое целое число периодов a_s . Следовательно, собственная функция $\psi_\alpha(u)$ должна удовлетворять теореме Флоке, то есть, их можно записать в блоховской форме

$$\psi_\alpha(u) = \eta_\alpha(u) \exp(i\kappa_\alpha u/a_s), \quad (6.116)$$

где функция $\eta_\alpha(u)$ периодична по u , а κ_α является “волновым вектором”. Аналогично схеме приведенной зоны для электрона в кристалле, собственные значения λ_α лежат в зонах, которые можно пронумеровать индексом p . Собственные значения в пределах каждой зоны однозначно определяются волновым вектором κ , который можно выбрать лежащим в первой зоне Бриллюэна $|\kappa| \leq \pi$. Далее удобно записать

$$\lambda_\alpha = \exp[-\beta \epsilon_p(\kappa)]. \quad (6.117)$$

Таким образом, функция разбиения (6.108) принимает форму

$$\mathcal{Z}(T, L, N) = \mathcal{Z}_1(T, N) \mathcal{Z}_2(T, L, N) \quad (6.118)$$

с

$$\mathcal{Z}_1(T, N) = \left(\beta \hbar \sqrt{g/m_a} \right)^{-N} \quad (6.119)$$

и

$$\mathcal{Z}_2(T, L, N) = \sum_{p=0}^{\infty} \int_{-\pi}^{+\pi} d\kappa \exp(-N\beta\epsilon_p(\kappa) - iN_w\kappa) C_p(\kappa), \quad (6.120)$$

где

$$C_p(\kappa) = \int_0^{a_s} du \eta_{\kappa p}^*(u) \eta_{\kappa p}(u). \quad (6.121)$$

Сумму по p и интегрирование по κ в уравнении (6.120) можно переписать в виде $\sum_p \int d\kappa \dots = \int d\epsilon \rho(\epsilon) \dots$, где $\rho(\epsilon) = [d\epsilon_p(\kappa)/d\kappa]^{-1}$ – плотность собственных состояний. Как это обычно для спектра одномерных систем, плотность $\rho(\epsilon)$ бесконечна на границах каждой зоны. Таким образом ясно, что главный вклад в термодинамические характеристики дают собственные состояния около границ зон. Очевидно также, что в $\mathcal{Z}_2$ доминирует вклад от нижней части наинизшей зоны с $p = 0$, и что в термодинамическом пределе $N \rightarrow \infty$ можно опустить не относящуюся к делу мультипликативную постоянную $C_p(\kappa)$.

Неудобный для вычисления интеграл по κ можно учесть рассматривая ансамбль “температура-давление” $Y(T, \Pi, N)$, который описывает ФК цепочку со “свободными концами” находящуюся под действием внешнего давления Π . Учитывая, что $L = L_0 + N_w a_s$ и $L_0 = N a_s$, уравнение (6.115) можно переписать в виде

$$Y(T, \Pi, N) = \mathcal{Z}_1(T, N) e^{-\beta \Pi L_0 a_s} \int_{-\pi}^{+\pi} d\kappa \exp[-N\beta\epsilon_0(\kappa)] \int_{-\infty}^{+\infty} dN_w \exp[-iN_w(\kappa - i\beta\Pi a_s)]. \quad (6.122)$$

Если мы рассмотрим $Y(\Pi)$ в комплексной Π -плоскости [551, 552, 554], то для мнимой $\Pi = ib$ (где b действительное) интеграл по N_w дает δ -функцию, поэтому

$$Y(T, \Pi, N) = \mathcal{Z}_1(T, N) \exp[-\beta L_0 \Pi - \beta N \epsilon_0(\kappa^*)], \quad (6.123)$$

где $\kappa^* = i\beta a_s \Pi$ (не относящиеся к делу мультипликативные константы опущены). Таким образом, свободная энергия Гиббса (6.116) принимает форму

$$G(T, \Pi, N) = F_1(T, N) + L_0 \Pi + N \epsilon_0(\kappa^*), \quad (6.124)$$

где

$$F_1(T, N) = N k_B T \ln \left(\beta \hbar \sqrt{g/m_a} \right). \quad (6.125)$$

Длина цепи L определяется давлением Π через соотношение

$$L = L_0 \left[1 + i\beta \left(\frac{d\epsilon_0(\kappa)}{d\kappa} \right)_{\kappa=\kappa^*} \right], \quad (6.126)$$

а свободная энергия Гельмгольца равна

$$F(T, L, N) = G - \Pi L = F_1(T, N) + N \left[\epsilon_0(\kappa) - \kappa \left(\frac{d\epsilon_0(\kappa)}{d\kappa} \right) \right]_{\kappa=\kappa^*},$$

где $\kappa^* = \kappa^*(T, L, N)$ – решение уравнение (6.126).

Итак, свободная энергия ФК цепочки без “окон”, $N_w = 0$ (или $\Pi = 0$ при $a_{\min} = a_s$), определяется энергией дна наименьшей зоны, $\epsilon_{\text{bottom}} = \epsilon_0(0)$, в то время как при $N_w \neq 0$ мы должны вычислить закон дисперсии для спектра собственных значений вблизи дна и затем продолжить его аналитически в область мнимых значений волнового вектора κ (см. работу [555]).

Полезно рассмотреть два следующих примера. Первый, это гармоническая цепочка атомов без внешнего потенциала $V_{\text{sub}}(x) \equiv 0$. В этом случае собственные функции уравнения (6.113) являются плоскими волнами $\eta_\alpha(u) = \text{Const}$, а собственные значения

$$\epsilon_0(\kappa) = \kappa^2 / 2\beta^2 g a_s^2. \quad (6.127)$$

Здесь мы можем использовать “схему расширенной зоны”, $-\infty < \kappa < +\infty$. Подставляя уравнение (6.127) в уравнение (6.120) и используя равенство $\sum_p \int_{-\pi}^{+\pi} d\kappa \dots = \int_{-\infty}^{+\infty} d\kappa \dots$, мы получим

$$\mathcal{Z}_2(T, L, N) = \left(\frac{2\pi\beta g a_s^2}{N} \right)^{1/2} \exp \left(-\frac{1}{2}\beta g a_s^2 N \tilde{w}^2 \right), \quad (6.128)$$

так что свободная энергия будет равна

$$F_A(T, L, N) = \frac{1}{2} N g a_s^2 \tilde{w}^2 + F_1(T, N) + \frac{1}{2} k_B T \ln N + O(N). \quad (6.129)$$

Первый член в правой части уравнения (6.129) описывает энергию сжатия или растяжения цепи (напомним, что $a_{\min} = a_s$), второй член F_1 соответствует вкладу акустических фонов, а последний член ($\propto \ln N$) исчезает в пределе $N \rightarrow \infty$. Уравнение (6.129) описывает ФК модель в пределе $k_B T \rightarrow \infty$. При высоких (но конечных) температурах $k_B T \gg \varepsilon_s$ (напомним, что $\varepsilon_s = 2$), потенциал подложки $V_{\text{sub}}(x)$ можно рассматривать как малое возмущение. В частности, Сузуки и Сасаки [519] дали следующее высоко-температурное разложение по обратным степеням $\tau = k_B T / \varepsilon_k$:

$$\beta \epsilon_{\text{bottom}} \sqrt{g} = \frac{1}{2^3 \tau} - \frac{1}{2^9 \tau^5} - \frac{7}{2^{23} \tau^7} - \frac{29}{2^{32} 3^2 \tau^{11}} + \dots, \quad (6.130)$$

из которого можно получить свободную энергию для случая нулевого параметра соразмерности.

Второе, собственные значения $\epsilon_p(\kappa)$ являются периодическими функциями от κ с периодом 2π и поэтому они могут быть разложены в ряды Фурье. Сохраняя в этих разложениях только первые члены, мы приходим к приближению

$$\epsilon_0(\kappa) = \epsilon_c - 2t \cos \kappa, \quad (6.131)$$

где ϵ_c – центр наименьшей зоны, а t – “интеграл перекрытия волновых функций ближайших электронов” в схеме сильной связи. Подставляя уравнение (6.131) в уравнение (6.120), мы получаем

$$\mathcal{Z}_2(T, L, N) = 2\pi \exp(-N\beta\epsilon_c) I_{N_w}(2N\beta t), \quad (6.132)$$

где I_N – модифицированная функция Бесселя. Кюри с соавторами [159] подчеркнули, что нужно ясно отличать случай $N_w = 0$ от случая $N_w \neq 0$. А именно, при $N_w = 0$ функции Бесселя имеют асимптотику $I_0(z) \simeq (2\pi z)^{-1/2} e^z$ при $z \rightarrow \infty$ [556], которая приводит к вкладу в свободную энергию

$$\begin{aligned} F_2(T, L, N) &= N(\epsilon_c - 2t) + \frac{1}{2} k_B T \ln N + O(N) \\ &= N\epsilon_{\text{bottom}} \quad \text{when } N \rightarrow \infty. \end{aligned} \quad (6.133)$$

С другой стороны, при $N_w \neq 0$, мы должны использовать асимптотику в которой одновременно и аргумент и порядок функции Бесселя стремятся к бесконечности. Однако, здесь простейшим путем является прямое использование уравнений (6.124) – (6.126), которое приводит к

$$G = F_1 + \Pi L_0 + N\epsilon_c - 2Nt \cosh(\beta a_s \Pi), \quad (6.134)$$

$$N_w = -2N\beta t \sinh(\beta a_s \Pi), \quad (6.135)$$

$$F = F_1 + N\epsilon_c - 2Nt [\cosh(\beta a_s \tilde{\Pi}) - (\beta a_s \tilde{\Pi}) \sinh(\beta a_s \tilde{\Pi})], \quad (6.136)$$

где $\tilde{\Pi} = \tilde{\Pi}(T, N_w, N)$ – решение уравнения (6.135). Сравнивая уравнение (6.136) с приближением газа квазичастиц (6.68) мы видим, что эти два выражения совпадают если t интерпретировать как

$$t = k_B T (N_{\text{pair}}/N) \quad (6.137)$$

и положить $\mu_w = a_s \tilde{\Pi}$ для “оконого химического потенциала” и $F_{\text{ph}}^{(0)} = F_1 + N\epsilon_c$ для вклада фононов в свободную энергию.

В общем случае решение уравнения преобразования (6.113) может быть найдено численными методами описанными Шнейдером и Штолем [520] и Гилланом и Холовэем [552]. Кроме того, приближенные результаты могут быть получены при сведении уравнения на собственные значения (6.113) к псевдо-Шредингеровскому уравнению.

6.5.2 Уравнение Шредингера

Используя операторное тождество [520]

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dy \exp[-b(x-y)^2] f(y) = \left(\frac{\pi}{b}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(\frac{1}{4b} \frac{d^2}{dx^2}\right) f(x), \quad (6.138)$$

Тогда уравнение (6.113) с ядром (6.111) может быть переписано в форме

$$\exp\left[-\frac{\beta}{2} V_{\text{sub}}(x)\right] \exp\left(\frac{1}{2\beta g} \frac{d^2}{dx^2}\right) \exp\left[-\frac{\beta}{2} V_{\text{sub}}(x)\right] \psi_{\alpha}(x) = \lambda_{\alpha} \psi_{\alpha}(x). \quad (6.139)$$

Тогда, собирая три экспоненты уравнения (6.139) в одну, мы можем записать уравнение (6.139) как

$$\exp\left(\frac{1}{2\beta g} \frac{d^2}{dx^2} - \beta V_{\text{sub}}(x) - \beta \widehat{W}\right) \psi_{\alpha}(x) = \lambda_{\alpha} \psi_{\alpha}(x), \quad (6.140)$$

или, что эквивалентно, в форме

$$\left[-\frac{1}{2} (\hbar^*)^2 \frac{d^2}{dx^2} + V_{\text{sub}}(x) + \widehat{W}\right] \psi_{p\kappa}(x) = \epsilon_p(\kappa) \psi_{p\kappa}(x), \quad (6.141)$$

где мы ввели “постоянную Планка”

$$\hbar^* = \frac{k_B T}{\sqrt{g/m_a}}. \quad (6.142)$$

Оператор $\widehat{W}$ может быть определен путем разложения экспонент уравнений (6.139) и (6.140) в ряды Тейлора. Этот путь приводит [548, 557] к выражению

$$\widehat{W} = \frac{1}{24g} \left\{ -[V'_{\text{sub}}(x)]^2 + \dots + \frac{2}{\beta^2 g} \left[-\frac{1}{4} V_{\text{sub}}''''(x) + V_{\text{sub}}''(x) \frac{d^2}{dx^2} + \dots \right] \right\}. \quad (6.143)$$

Таким образом, оператор $\widehat{W}$ в уравнении (6.141) может быть опущен если одновременно выполнены два условия: (а) $g \gg 1$, или $d \gg a_s$ (d – ширина кинка), и (б) $\beta^2 g \geq 1$, или $k_B T < \epsilon_k$ (заметим, что это условие приводит к неравенству $\hbar^* \leq 1$). В этом случае уравнение (6.141) выглядит похожим на одночастичное “уравнение Шредингера” для “электрона” с единичной массой и “постоянной Планки” $\hbar^*$. (Коррекция “уравнения Шредингера” дискретностью решетки в первом порядке была изучена Труллигером и Сасаки [548]). Для периодической функции $V_{\text{sub}}(x)$, уравнение (6.141) известно как уравнение Хилла и в частном случае синусоидального потенциала – как хорошо изученное уравнение Матье (см., например, книгу [556]).

При очень низких температурах $k_B T \ll \epsilon_k$, когда $\hbar^* \ll 1$, применимо приближение сильной связи (узких зон) (6.131) [533]. Здесь собственные функции $\nu_{\kappa}(x)$ будут почти независимыми от κ . Они строго локализуются в ямах потенциала $V_{\text{sub}}(x)$, так что ϵ_c хорошо приближается наинизшим уровнем гармонического осциллятора с $\epsilon_c = \frac{1}{2} \hbar^* \omega_0$ (напомним, что $\epsilon_c \ll \epsilon_s = 2$), а сумма $F_1 + N\epsilon_c$ будет давать вклад фононов $F_{\text{ph}}^{(0)}$, совпадающий в пределе $g \gg 1$ с уравнением (6.19). Присутствие других потенциальных ям приводит к появлению экспоненциально малого “туннельного расширения” уровня в непрерывную зону с шириной $4t$. Для того чтобы оценить “скорость туннелирования” t , мы можем использовать приближение ВКБ (Вентцеля-Крамерса-Бриллюэна) которое, однако, приводит к очень грубому выражению для предэкспоненциального множителя. Улучшенное ВКБ приближение [558]–[561] дает выражение

$$t = (\hbar^* \omega_0) (2\beta \epsilon_k / \pi)^{1/2} e^{-\beta \epsilon_k}. \quad (6.144)$$

Нетрудно заметить, что уравнения (6.136), (6.137), (6.142), (6.144) дают вклад в свободную энергию, который точно совпадает с вкладом кинков из уравнений (6.68), (6.93), полученных при использовании приближении газа квазичастиц.

Для общего случая потенциала $V_{\text{sub}}(x)$, решения уравнения Хилла (6.141) могут быть найдены стандартными методами зонной теории твердого тела, например, при помощи метода функции Грина [562]–[564]. Наиболее хорошо изученным является СГ случай с нулевым параметром соразмерности. Здесь наименьшее собственное значение найдено Сузуки и Сасаки [519] в виде двойного ряда по степеням $\tau = k_B T / \epsilon_k$ и $\nu = \exp(-1/\tau)$

$$\begin{aligned} \frac{\epsilon_{\text{bottom}}}{\hbar^* \omega_0} &= \frac{1}{2} \left[1 - \frac{1}{2} \tau + O(\tau^2) \right] - \left(\frac{8}{\pi \tau} \right)^{1/2} \nu \left[1 - \frac{7}{8} \tau + O(\tau^2) \right] \\ &+ \left(\frac{8}{\pi \tau} \right) \nu^2 \left[\ln \frac{4\gamma_0}{\tau} - \frac{5}{4} \tau \left(\ln \frac{4\gamma_0}{\tau} + 1 \right) + O(\tau^2) \right] + O(\nu^3), \end{aligned} \quad (6.145)$$

где постоянная Эйлера $\ln \gamma_0 = 0.5772$. Сравнивая это выражение с результатами приближения квазичастичного газа, мы видим, что первый член в уравнении (6.145) соответствует вкладу фононов с ангармоничными поправками, второй – вкладу кинков, а последний член описывает кинк-кинковые взаимодействия.

Уравнение (6.145) позволяет нам вычислить теплоемкость СГ модели при низких температурах [519],

$$(c_N - k_B) = (k_B/\sqrt{g}) h(\tau), \quad (6.146)$$

где функция перенормировки $h(\tau)$ зависит только от безразмерной температуры

$$h(\tau) = -\frac{1}{\tau^2} \frac{d^2}{d(\tau^{-1})^2} \left(\frac{\epsilon_{\text{bottom}}}{\hbar^* \omega_0} \right). \quad (6.147)$$

Вид функции $h(\tau)$ показан на рис. 6.8. При увеличении температуры от нулевого значения $T = 0$, теплоемкость возрастает, так как в системе возбуждается все больше и больше кинков. Эта ситуация сохраняется до тех пор пока взаимодействие между кинками не начинает подавлять рост плотности кинков и теплоемкость достигает максимального значения. При высоких температурах модель газа квазичастиц перестает быть применимой, а отклонение функции $h(\tau)$ от нуля может быть объяснено как малый вклад в теплоемкость гармонической цепи, обусловленный присутствием ангармоничного потенциала подложки $V_{\text{sub}}(x)$. Таким образом, максимум в зависимости $c_N(T)$ может быть рассмотрен как особенность типа аномалии Шотки, обусловленная термически возбужденными кинками [520, 562].

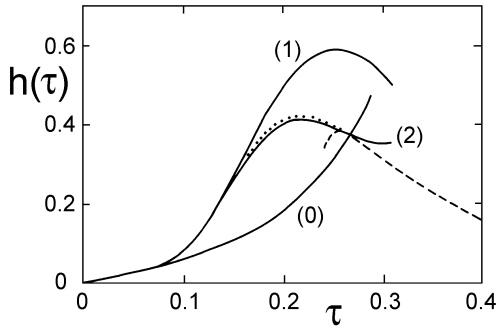


Рис. 6.8. Вид функции $h(\tau)$ для теплоемкости модели СГ. Показаны полученная численно зависимость (точечная кривая) и зависимости полученные в рамках низкотемпературного приближения (сплошные кривые) без учета поправки от туннелирования (кривая 0), с поправкой первого порядка ν (кривая 1) и ν^2 (кривая 2). Пунктирная кривая получена в рамках высокотемпературного приближения [519].

6.5.3 Восприимчивость

Восприимчивость χ ФК цепочки заслуживает более детального рассмотрения в силу ее важной роли при переносе массы. Кроме того, параметр χ характеризует “порядок” системы, так как $\chi = 0$ для упорядоченного состояния (при $T = 0$ для одномерных моделей) и $\chi = 1$ для полностью неупорядоченного состояния (например, при $T \rightarrow \infty$ или $g \rightarrow 0$). Согласно определению (6.15), восприимчивость χ описывает среднее квадратичные флуктуации относительного смещения $x_{l'+l} - x_{l'}$ относительно его среднего значения

$$A_l \equiv \frac{1}{N} \sum_{l'} \langle [(x_{l'+l} - x_{l'}) - \langle x_{l'+l} - x_{l'} \rangle]^2 \rangle = \chi a_A^2 |l|. \quad (6.148)$$

Для ФК цепочки длины $L = Na_A$ с “фиксированной плотностью” уравнение (6.148) изменяется к виду [565]

$$A_l = \chi a_A^2 l(1 - l/N), \quad l = 1, 2, \dots, N. \quad (6.149)$$

Для ФК модели со “свободными концами” и гармоническим потенциалом $V_{\text{int}}(x)$, параметр соразмерности $\tilde{w}$ как функция давления Π увеличивается к 1 когда Π убывает к ga_s [552]

$$\tilde{w}(\Pi - kga_s) = \tilde{w}(\Pi) + k; \quad k = 0, \pm 1, \dots \quad (6.150)$$

Следовательно, из уравнения (6.18) следует, что $\phi = \chi/n^2$ является периодической функцией от Π с периодом ga_s и периодической функцией от $\tilde{w}$ с периодом 1. В силу кинк-антикинковой симметрии функция ϕ должна быть четной относительно $\tilde{w}$, $\phi(-\tilde{w}) = \phi(\tilde{w})$.

Уравнения (6.18) и (6.124) связывают χ с собственным значением наименьшей зоны уравнения ТИ соотношением

$$\chi = \beta(na_s)^2 \frac{d^2 \epsilon_0(\kappa)}{d\kappa^2} \Big|_{\kappa=i\beta\Pi a_s}. \quad (6.151)$$

Легко проверить, что приближение свободных электронов (6.127) для $\epsilon_0(\kappa)$ дает значение $\chi = k_B T / g a_s^2$, см. уравнение (6.31), в то время как tight-binding приближение (6.131) приводит к выражению

$$\chi = \beta(na_s)^2 2t \cosh(\beta a_s \Pi), \quad (6.152)$$

которое совпадает с уравнением (6.76) если учесть уравнение (6.137). В общем случае величина χ может быть вычислена только в предельных случаях. Первое, это в пределе слабой связи $g \ll 1$. Здесь ФК модель приближенно сводится к модели Изинга, уравнения (6.45) – (6.48). Вследствие сильного уменьшения постоянной взаимодействия $I(l)$ с ростом l , разумно оставить только отталкивание ближайших соседних вакансий, то есть положить $I(l) = 0$ для всех $|l| \geq 1$. Таким образом, мы приходим к классической модели Изинга (или модели решеточного газа Ленгмюра) с гамильтонианом

$$H = \sum_{j=1}^M (I_0 h_j h_{j+1} - \mu_h h_j), \quad (6.153)$$

где $I_0 \simeq g a_s^2$, h_j означает “число дырок” на j -той яме потенциала подложки ($h_j = 0$ или 1), а “дырочный химический потенциал” μ_h определяет среднее значение величины $\langle h_j \rangle \equiv M^{-1} \sum_{j=1}^M h_j$, которое связано с концентрацией θ соотношением

$$\langle h_j \rangle = 1 - \theta. \quad (6.154)$$

Предполагая периодические граничные условия, основную каноническую функцию

$$\Xi(T, L, \mu_h) = \sum_{\{h_j\}} \exp(-\beta H) \quad (6.155)$$

теперь можно вычислить точно используя ТИ метод (см., например, монографию [566]). В результате получим:

$$J(T, L, \mu_h) \equiv -k_B T \ln \Xi = \frac{1}{4} M (I_0 - 2\mu_h) - k_B T M \ln \lambda_+, \quad (6.156)$$

$$\langle N_w \rangle \equiv M \langle h_j \rangle = \frac{1}{2} M [1 + \operatorname{sgn}(\Phi) \cos(2\Phi)], \quad (6.157)$$

$$Q_{ij} \equiv \langle h_i h_j \rangle - \langle h_i \rangle \langle h_j \rangle = \frac{1}{4} \sin^2(2\Phi) \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^{|i-j|}, \quad (6.158)$$

где

$$\lambda_{\pm} = e^{-\beta I_0/4} \cosh \left[\frac{1}{2} \beta (I_0 - \mu_h) \right] \pm \left\{ e^{\beta I_0/2} + e^{-\beta I_0/2} \sinh^2 \left[\frac{1}{2} \beta (I_0 - \mu_h) \right] \right\}^{1/2}, \quad (6.159)$$

$$\tan(2\Phi) = \exp \left(\frac{1}{2} \beta I_0 \right) / \sinh \left[\frac{1}{2} \beta (\mu_h - I_0) \right], \quad |\Phi| < \pi/4. \quad (6.160)$$

Уравнения (6.157) и (6.160) связывают μ_h с концентрацией θ через соотношение

$$\sin^2 2\Phi = 4\theta(1 - \theta). \quad (6.161)$$

Теперь, используя уравнения (6.158), (6.159), (6.161) и вспоминая, что $N = \sum_{j=1}^M (1 - h_j)$, мы можем вычислить χ прямо из его определения (6.16):

$$\chi = (1 - \theta) \{1 - 4\theta(1 - \theta) [1 - \exp(-\beta I_0)]\}^{1/2}, \quad \theta \leq 1. \quad (6.162)$$

Заметим, что выражение (6.162) предполагает, что $k_B T \gg I(1) \simeq g^2 a_s^2$, так как мы здесь пренебрегли отталкиванием следующих соседних вакансий.

При низких температурах можно использовать идеологию “идеального газа кинков” [565]. В частности, мы рассмотрим ФК цепь с фиксированной плотность находящейся в С-фазе с $\theta = s/q$ при $T = 0$. Напомним, что на фоне этой структуры мы можем определить суперкинки (кратко s-кинки) и s-антикинки, которые характеризуются энергиями покоя ϵ_{sk} и $\epsilon_{\bar{s}k}$. При $T \neq 0$ равновесное состояние цепи содержит N_{sk} s-кинок и $N_{\bar{s}k}$ s-антикинок. Так как кинки и антикинки могут появляться только кинк-антикинковыми парами, мы имеем

$$\langle N_{sk} \rangle = \langle N_{\bar{s}k} \rangle \propto \exp(-\beta E_{sk}), \quad (6.163)$$

где $E_{sk} = \frac{1}{2}(\varepsilon_{sk} + \varepsilon_{\bar{s}\bar{k}})$. (К сожалению, для предэкспоненциального множителя в уравнении (6.163) для тривиального ОС ($s = 1$) имеется аналитический вид только в случае $g \gg 1$.) Теперь, давайте возьмем в ФК цепи секцию длины $\tilde{L}$ и предположим, что $\tilde{L} \ll L$, но $\tilde{L}$ является достаточно большим для того чтобы содержать $\tilde{N}$ атомов, $\tilde{N}_{sk}$ s-кинок и $\tilde{N}_{\bar{s}\bar{k}}$ s-антикинок с $\tilde{N}, \tilde{N}_{sk}, \tilde{N}_{\bar{s}\bar{k}} \gg 1$. Тогда, допустим, что s-кинки и s-антикинки являются невзаимодействующими и поэтому их распределение вероятности будет пуассоновским,

$$\langle \tilde{N}_{sk}^2 \rangle - \langle \tilde{N}_{sk} \rangle^2 = \langle \tilde{N}_{sk} \rangle, \quad (6.164)$$

$$\langle \tilde{N}_{\bar{s}\bar{k}}^2 \rangle - \langle \tilde{N}_{\bar{s}\bar{k}} \rangle^2 = \langle \tilde{N}_{\bar{s}\bar{k}} \rangle, \quad (6.165)$$

$$\langle \tilde{N}_{sk} \tilde{N}_{\bar{s}\bar{k}} \rangle = \langle \tilde{N}_{sk} \rangle \langle \tilde{N}_{\bar{s}\bar{k}} \rangle. \quad (6.166)$$

Вспоминая, что каждый s-кинк содержит $1/q$ лишних атомов, а каждый s-антикинк, такое же число вакансий, мы можем записать число атомов на длине $\tilde{L}$ как

$$\tilde{N} = \tilde{N}_0 + \frac{1}{q}(\tilde{N}_{sk} - \tilde{N}_{\bar{s}\bar{k}}), \quad (6.167)$$

где $\tilde{N}_0 = n\tilde{L}$ – число атомов при $T = 0$. Используя уравнения (6.164) – (6.167), из определения (6.15) мы получим значение

$$\chi = \frac{\langle N_{s,\text{tot}} \rangle}{q^2 \langle N \rangle}, \quad (6.168)$$

где $\langle N_{s,\text{tot}} \rangle = \langle N_{sk} \rangle + \langle N_{\bar{s}\bar{k}} \rangle$, а тильда была опущена. Полученное выражение (6.168) является справедливым только для достаточно малых температур

$$k_B T \ll E_{sk}, \quad (6.169)$$

когда концентрация термически возбужденных s-кинок так мала, что они могут быть рассмотрены как невзаимодействующие квазичастицы. Для тривиальной С-фазы ($s = 1$) уравнение (6.168) совпадает с ранее полученным уравнением (6.76), если вспомнить, что в этом случае $q = 1 + \tilde{w}$.

Когда $k_B T \geq E_{sk}$, концентрация термически возбужденных s-кинк–s-антикинковых пар так велика, что они “расплавляют” фоновую С-структуру. Однако, если С-фаза была нетривиальной, $s \neq 1$, метод газа кинков остается полезным до температур $k_B T \leq E_k$. В качестве примера давайте рассмотрим случай $s = q - 1$ с $q \gg 1$, где ОС при $T = 0$ может быть рассмотрено как регулярная структура антикинок (с числом N_w) определенных на фоне структуры с $\theta = 1$. При $g \gg 1$ эти антикинки характеризуются $d = a_s \sqrt{g}$, $E_k = 8\sqrt{g}$, $\varepsilon_{PN} = (16\pi^4/3)g \exp(-\pi^2 \sqrt{g})$, и $v_{\text{int}}(R) = 32\sqrt{g} \exp(-R/d)$, где $R \equiv qa_s \gg d$. Рассматривая антикинки как квазичастицы, мы приходим к эффективной ФК модели с постоянной жесткости

$$g^* \equiv a_s^2 v_{\text{int}}''(R)/2\pi^2 \varepsilon_{PN} = 3\pi^{-6} g^{-3/2} \exp(\pi^2 \sqrt{g} - q/\sqrt{g}). \quad (6.170)$$

Здесь мы уже можем вычислить энергию s-кинка E_k^* как $E_k^* = 8\sqrt{g^*}$ если $g^* \gg 1$, или как $E_k^* = 2\pi^2 g^*$ если $g^* \ll 1$. Возвращаясь к старым единицам, мы должны положить $E_{sk} = E_k^* \varepsilon_{PN}/2$, получая при этом

$$\frac{E_{sk}}{E_k} \simeq \begin{cases} 2g^{-1} \exp(-q/\sqrt{g}) & \text{если } q > \pi^2 g, \\ (8\pi/\sqrt{3})g^{-1/4} \exp(-\pi^2 \sqrt{g}/2) & \text{если } \sqrt{g} \ll q < \pi^2 g. \end{cases} \quad (6.171)$$

Из уравнения (6.171) мы видим, что если $q \gg \sqrt{g}$, то существует широкий температурный интервал

$$E_{sk} \leq k_B T \ll E_k, \quad (6.172)$$

в котором тривиальная ($\theta = 1$) структура атомов все еще существует, в то время как первичная С-фаза (когда $\theta = (q-1)/q$) будет неупорядоченной, так как решетка антикинок уже расплавилась и поэтому они могут быть рассмотрены как газ невзаимодействующих квазичастиц. Теперь, повторяя вычисления как мы делали выше, мы получим для интервала (6.172) выражение

$$\chi = \frac{\langle N_{\text{tot}} \rangle}{\langle N \rangle}, \quad (6.173)$$

где $\langle N_{\text{tot}} \rangle = [\langle 2N_{\text{pair}} \rangle^2 + \langle N_w \rangle^2]^{1/2}$, см. уравнение (6.73). Из уравнения (6.173) следует, что на левой стороне интервала (6.172) функция $\chi(T)$ имеет плато $\chi \simeq \tilde{w}$, в то время как на правой стороне, $\chi(T)$ возрастает экспоненциально из-за добавления к расплавленной решетке кинков термически возбужденных кинк-антикинковых пар – см. Рис. 6.9.

С помощью соображений ренормализации (параграф 5.2.1)) мы аналогично можем описать температурную зависимость χ для более сложных структур с $s \neq 1, q-1$. Рассматривая ФК систему как иерархию последовательно

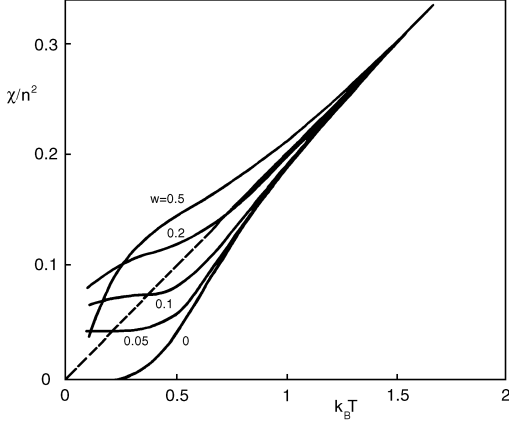


Рис. 6.9. Восприимчивость χ как функция температуры T при различных winding numbers $\tilde{w}$ для стандартной ФК модели с $\Gamma \equiv ga_s^2 = 5$ [552].

расплавленных решеток суперкинков, мы можем разделить температурный интервал $0 \leq k_B T < E_k$ на подинтервалы, в которых более сложная структура суперкинков уже расплавлена, но более простая еще остается и допускает определение соответствующих s-кинков и s-антикинков, которые приблизительно в этом температурном подинтервале не взаимодействуют между собой. Таким образом, функция $\chi(T)$ должна иметь множество плат на низкотемпературных сторонах этих подинтервалов и меняться экспоненциально между этими платами.

С дальнейшим возрастанием температуры $k_B T > E_k$, функция $\chi(T)$ стремится асимптотически к $\chi(T) = k_B T / ga_A^2$. Однако, в пределе $T/g \rightarrow \infty$ эта асимптотика имеет нефизическое поведение $\chi \rightarrow \infty$ вместо правильного $\chi \rightarrow 1$. Причина этого связана с приближенной природой стандартной ФК модели. А именно, при $k_B T \geq ga_A^2$ относительные смещения атомов не являются малыми, относительные смещения $|x_{l+1} - x_l - a_{\min}|$ должны превышать значение a_A и гармоническое приближение для межатомного потенциала $V_{\text{int}}(x)$ становится неприменимым. Для выяснения высокотемпературного поведения $\chi(T)$, давайте рассмотрим экспоненциальное взаимодействие

$$V_{\text{int}}(x) = gb^2(e^{-r} - 1 + r), \quad r \equiv (x - a_{\min})/b, \quad (6.174)$$

где обратная длина b^{-1} играет роль параметра ангармонизма

$$V_{\text{int}}(x) \simeq \frac{1}{2}g(x - a_{\min})^2 [1 - (x - a_{\min})/3b], \quad |x - a_{\min}| \ll b. \quad (6.175)$$

Опустив потенциал подложки при $k_B T \geq E_k \gg \varepsilon_s$ (напомним, что $g \gg 1$), модель с взаимодействием (6.174) будет соответствовать системе Тоды, которая имеет точное решение [270]. Свободная энергия Гиббса цепи Тоды со “свободными концами” имеет форму

$$G(T, \Pi, N) = -k_B T N \ln \left[(m_a k_B T / 2\pi \hbar^2)^{1/2} y \exp(-\beta \Pi a_{\min}) \right], \quad (6.176)$$

где

$$y(T, \Pi) = be^B \Gamma(B + \beta b \Pi) / B^{B + \beta b \Pi}, \quad (6.177)$$

$$B = \beta gb^2, \quad (6.178)$$

а $\Gamma(x)$ – гамма-функция. Длина цепи определяется из уравнений

$$L(T, \Pi, N) = \left(\frac{\partial G}{\partial \Pi} \right)_{T, N} = N(a_{\min} + \delta a), \quad (6.179)$$

$$\delta a(T, \Pi) = b [\ln B - \Psi(B + \beta b \Pi)], \quad (6.180)$$

где $\Psi(x) = \frac{d}{dx} \ln \Gamma(x)$. Используя определение (6.18), мы из уравнений (6.179) и (6.180) получим что восприимчивость равна

$$\chi = -k_B T \frac{N}{L^2} \frac{\partial L}{\partial \Pi} \bigg|_{\Pi=0} = \frac{\Psi'(B)}{(\ln B - \Psi(B) + a_{\min}/b)^2}. \quad (6.181)$$

Из уравнения (6.181) следует, что уравнение (6.31) работает только для промежуточных температур

$$E_k \leq k_B T \ll gb^2, \quad (6.182)$$

когда $B \gg 1$, $\Psi(B) \simeq \ln B - \frac{1}{2B} - \frac{1}{12B^2}$, и

$$\chi \simeq \frac{k_B T}{g(a_{\min} + \delta a)^2} \left(1 + \frac{1}{2\beta g b^2} \right). \quad (6.183)$$

При высоких температурах

$$k_B T \gg g b^2, \quad (6.184)$$

когда $B \ll 1$ и $\Psi(B) \simeq -\gamma_0 - \frac{1}{B}$, γ_0 – постоянная Эйлера, восстанавливается правильный предел $\chi \rightarrow 1$:

$$\chi \simeq [1 + (a_{\min}/b)B + B \ln B]^{-2} \simeq 1 - 2\beta g b a_{\min}. \quad (6.185)$$

В пределе $b \rightarrow 0$ потенциал (6.174) сводится к потенциалу с жестким ядром $V_{\text{int}}(x) = V_0 \Theta(a_{\min} - x)$ с $V_0 \rightarrow \infty$. В этом случае уравнения (6.179), (6.180), (6.181) приводят к выражению [567]: $\chi = (1 - n a_{\min})^2$, где $n = N/L$.

6.5.4 Иерархия решеток суперкинков

Согласно методу ренормализации параграфа 5.2.1, сложная соразмерная С-структура ФК цепочки с фиксированной плотностью при концентрации $\theta = s/q$ (s – число атомов в одной элементарной ячейке) может быть рассмотрена как решетка кинков построенная на фоне более простой соразмерной структуры C_0 , называемой фоновой структурой. Более того, процедура ренормализации может быть повторена необходимое число раз, приводя тем самым к набору кинковых (суперкинковых) решеток. В силу одномерности модели ФК, все эти решетки (суперрешетки) будут неупорядоченными при любой ненулевой температуре T . Однако, при низких температурах этот беспорядок является “малым”, и система может быть рассмотрена как регулярная решетка взаимодействующих квазичастиц (атомов, кинков, суперкинков и т.д.). Данную решетку можно интерпретировать как фоновую структуру, характеризуемую концентрацией $\tilde{\theta} = \tilde{s}/\tilde{q}$ и некоторым эффективным внешним потенциалом с периодом $\tilde{a}_s$. На фоне этой структуры уже имеется только малое числом приближенно невзаимодействующих топологических возбуждений (кинков, суперкинков, супер-суперкинков, и т.д.), которые характеризуются шириной $\tilde{d}$ и энергией покоя $\tilde{E}_k$. Заметим, что эти топологические возбуждения могут быть как остаточными, так и термически возбужденными. Как было показано в части 5.2.1, фоновые структуры имеют сложное (высокоупорядоченное) строения. Возбуждения на фоне этих структур имеют наименьшую энергию $\tilde{E}_k$, поэтому при данной температуре T здесь будет наибольшее число термически возбужденных кинков (суперкинков). Интуитивно ясно, что когда концентрация возбуждений становится слишком большой, они начинают разрушать порядок фоновой структуры и данная фоновая структура исчезает (“плавится”). В этом параграфе мы получим уравнение для этой температуры “плавления”, отметим, что ее не нужно путать с критической температурой T_c , которая всегда равна нулю для одномерных систем с коротко-действующими взаимодействиями.

Как было показано в параграфе 6.5.3, относительные положения двух квазичастиц расположенных на расстоянии x , $x = l a_A$, флуктуируют с амплитудой

$$\delta(x) = \sqrt{A_l} = \sqrt{\chi a_A |x|}. \quad (6.186)$$

Для того чтобы можно было определить топологические возбуждения для фоновой структуры с $\tilde{\theta} = \tilde{s}/\tilde{q}$ необходимо, чтобы эти относительные флуктуации были достаточно малы: $\delta(x) \leq \tilde{a}_s/\tilde{s}$, по крайней мере на расстояниях превышающих ширину кинка, $\tilde{x} \geq \tilde{d}$. Таким образом мы приходим к верхнему пределу при котором данная фоновая структура может считаться регулярной структурой, соответствующее уравнение имеет форму

$$\delta(\tilde{d}) = \tilde{a}_s/\tilde{s}, \quad \text{или} \quad \chi(T) a_A \tilde{s}^2 \tilde{d} = \tilde{a}_s^2. \quad (6.187)$$

Решение уравнения (6.187) определяет температуру $\tilde{T}_{\text{melt}}$, выше которой данная фоновая структура разрушается из-за тепловых флуктуаций. Беря выражение (6.168) для $\chi(T)$, мы видим что при $T = \tilde{T}_{\text{melt}}$ среднее расстояние $\tilde{R}$ между топологическими возбуждениями равно $\tilde{d}$, так что при $T > \tilde{T}_{\text{melt}}$ полная концентрация суперкинков становится такой большой, что они начинают перекрываться.

В случае тривиальной фоновой структуры ($\tilde{s} = 1$) для восприимчивости $\chi(T)$ имеется аналитическое выражение и уравнение (6.187) может быть сведено к формуле $(2\beta \tilde{E}_k/\pi)^{\frac{1}{2}} \exp(-\beta \tilde{E}_k) = 1$, приводящей к результату

$$k_B \tilde{T}_{\text{melt}} \simeq \tilde{E}_k. \quad (6.188)$$

Разумно ожидать, что выражение (6.188) остается справедливым для всех суперструктур с нулевым числом остаточных суперкинков (хотя это утверждение еще не доказано для общего случая). Если число остаточных (нетермических) суперкинков отлично от нуля, то $k_B \tilde{T}_{\text{melt}} < \tilde{E}_k$, так как остаточные s-кинки дополняются

термически возбужденными s-кинк–s-антикинковыми парами и поэтому условие $\tilde{R} = \tilde{d}$ здесь достигается при более низкой температуре.

В то время как в ФК цепи с “фиксированной плотностью” кинки могут появляться только как кинк-антикинковые пары, то в ФК цепи со “свободным концом” возможно также рождение только одного суперкинка или супер-антикинка (с энергией ε_{sk} или $\varepsilon_{\bar{s}k}$) у свободного конца цепочки. Следовательно, уравнение (6.188) в случае “свободного конца” должно быть преобразовано в следующую форму

$$k_B \tilde{T}_{\text{melt}} \simeq \min\{\varepsilon_{sk}, \varepsilon_{\bar{s}k}\}. \quad (6.189)$$

Данная фоновая структура главным образом устойчива в центрах ступеней дьявольской лестницы при $T = 0$ (то есть, в точках соответствующих ФвдМ переходам), а температура плавления сводится к нулю.

Таким образом, целый температурный интервал $0 < k_B T < E_k$ может быть разделен на m подинтервалов ($m = 1$ для $s = 1$, $m = 2$ для $s = q - 1$, и т.д.), где применимо приближение газа суперкинков на фоне соответствующих фоновых структур.

6.5.5 Равновременные корреляционные функции

Теперь давайте рассмотрим пространственную корреляционную функцию характеризующую структуру ФК цепочки. Двух-частичная корреляционная функция определяется формулой

$$Q_{AB}(l - l') = \langle \delta A_l^* \delta B_{l'} \rangle, \quad (6.190)$$

где $\delta A_l = A_l - \langle A_l \rangle$, и A_l, B_l – функции от смещений атомов u_l (напомним, что $u_l = x_l - l a_s$) и, возможно, от их производных $\dot{u}_l, \ddot{u}_l$, и т.д. В силу пространственной однородности цепи удобно применить Фурье преобразование

$$\tilde{A}(\kappa) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_l e^{-i\kappa l} \delta A_l, \quad (6.191)$$

и определить функции

$$\tilde{Q}_{AB}(\kappa) = \langle \tilde{A}(-\kappa) \tilde{B}(\kappa) \rangle = \sum_l e^{-i\kappa l} Q_{AB}(l). \quad (6.192)$$

Функция $\tilde{Q}_{AA}(\kappa)$ известна как формфактор A .

Простейшая форма имеет формфактор скорости $\dot{u}_l$:

$$Q_{\dot{u}\dot{u}}(l) = (k_B T / m_a) \delta_{l0}; \quad \tilde{Q}_{\dot{u}\dot{u}}(\kappa) = k_B T / m_a. \quad (6.193)$$

Некоторые корреляционные функции связаны между собой в силу уравнения движения

$$\ddot{u}_l + \omega_0^2 s_l - g(u_{l+1} + u_{l-1} - 2u_l) = 0, \quad (6.194)$$

Фурье преобразование которого имеет форму

$$\ddot{u}(\kappa) + \omega_0^2 \tilde{s}(\kappa) + 2g(1 - \cos \kappa) \tilde{u}(\kappa) = 0, \quad (6.195)$$

где мы использовали обозначения $s_l \equiv \sin u_l$ и $c_l \equiv \cos u_l$. Действительно, используя уравнение

$$\langle \dot{u}_l u_{l'} \rangle = \langle \dot{u}_l \rangle \langle u_{l'} \rangle = 0 \quad (6.196)$$

и дифференцируя его по времени, мы получаем соотношение

$$\omega_0^2 \tilde{Q}_{su}(\kappa) + 2g(1 - \cos \kappa) \tilde{Q}_{uu}(\kappa) = k_B T. \quad (6.197)$$

Аналогично, начиная от тождества $\langle \ddot{u}\dot{u} \rangle = 0$ и используя уравнение (6.195), мы приходим к соотношениям

$$\tilde{Q}_{\ddot{u}\dot{u}}(\kappa) = k_B T [\omega_0^2 \langle c_l \rangle + 2g(1 - \cos \kappa)], \quad (6.198)$$

$$\omega_0^4 \tilde{Q}_{ss}(\kappa) = 4g^2(1 - \cos \kappa)^2 \tilde{Q}_{uu}(\kappa) + k_B T [\omega_0^2 \langle c_l \rangle - 2g(1 - \cos \kappa)]. \quad (6.199)$$

Имеется два типа корреляционных функций, в зависимости от того, являются ли A_l и B_l периодическими или непериодическими функциями от u_l . Непериодические функции от u_l используются при анализе диффузии и транспорта массы (заряда, спина, и т.д.) описываемого в рамках ФК-подобных моделей. Ниже мы рассмотрим как пример таких корреляционных функций формфактор смещения Q_{uu} . С другой стороны, корреляционные функции от периодических функций $A(u)$ (типа функций $s \equiv \sin u$, $c \equiv \cos u$, $s_{\frac{1}{2}} \equiv \sin \frac{1}{2}u$, $c_{\frac{1}{2}} \equiv \cos \frac{1}{2}u$)

представляют самый большой интерес в экспериментах рассеяния. Важно, что эти эксперименты допускают возможность изолировать вклады кинков, выбирая подходящим образом векторы рассеяния (и частоты в случае динамической корреляционной функции).

Равновременные корреляционные функции для классической ФК модели могут быть вычислены точно с помощью метода ТИ. С целью рассмотреть случай $N_\omega \neq 0$, давайте возьмем ансамбль “температура-давление” в котором корреляционная функция выражается как

$$Q_{AB}(l_1 - l_2) = Y^{-1} e^{-\beta \Pi L_0} \int \frac{d(\Delta L)}{(2\pi\hbar)^{-N}} \int d\dot{u}_1 \dots du_N \int du_{N+1} \delta A(u_{l_1}) \delta B(u_{l_2}) \delta(u_{N+1} - u_1 - \Delta L) \exp[-\beta H(\dot{u}_1 \dots u_{N+1})] e^{-\beta \Pi \Delta L}.$$

Повторяя вычисления которые мы сделали в параграфе 6.5.1, мы приходим к соотношению [496, 520]

$$Q_{AB}(l_1 - l_2) = (\mathcal{Z}_1/Y) e^{-\beta \Pi L_0} \sum_{\alpha\beta\gamma} \lambda_\beta^{l_1-1} A_{\beta\gamma} \lambda_\gamma^{l_2-l_1} B_{\gamma\alpha} \lambda_\alpha^{N-l_2+1} \int_{-\infty}^{+\infty} d(\Delta L) e^{-\beta \Pi \Delta L} C_{\alpha\beta}(\Delta L), \quad (6.200)$$

где

$$A_{\beta\gamma} = \int_{-\infty}^{+\infty} du \psi_\beta^*(u) \delta A(u) \psi_\gamma(u) \equiv \langle \beta | \delta A | \gamma \rangle, \quad (6.201)$$

$$B_{\gamma\alpha} = \int_{-\infty}^{+\infty} du \psi_\gamma^*(u) \delta B(u) \psi_\alpha(u), \quad (6.202)$$

$$C_{\alpha\beta}(\Delta L) = \int_0^{a_s} du \psi_\alpha^*(u + \Delta L) \psi_\beta(u). \quad (6.203)$$

В термодинамическом пределе, $N \rightarrow \infty$, эти выражения упрощаются

$$Q_{AB}(l_1 - l_2) = \sum_{\kappa', p} \langle \kappa^*, 0 | \delta A | \kappa', p \rangle \langle \kappa', p | \delta B | \kappa^*, 0 \rangle \exp \{ -\beta |l_1 - l_2| [\epsilon_p(\kappa') - \epsilon_0(\kappa^*)] \}, \quad (6.204)$$

где $\kappa^* = i\beta a_s \Pi$. Преобразование Фурье (6.192) уравнения (6.204):

$$\tilde{Q}_{AB}(\kappa) = \sum_{\kappa', p} \langle \dots \rangle \langle \dots \rangle \frac{\sinh \beta [\epsilon_p(\kappa') - \epsilon_0(\kappa^*)]}{\cosh \beta [\epsilon_p(\kappa') - \epsilon_0(\kappa^*)] - \cos \kappa}. \quad (6.205)$$

Ясно, что на больших расстояниях в корреляционной функции $Q_{AB}(l)$ доминирует ТИ состояние с наименьшим собственным значением, для которого соответствующие матричные элементы не обращаются в ноль.

Положив в уравнении (6.204) формально $\delta B \equiv 1$, мы получим, что одночастичное усреднение функции $A(u_l)$ может быть выражено как

$$\langle A(u_l) \rangle = \langle \kappa^*, 0 | A | \kappa^*, 0 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} du A(u) P_0(u), \quad (6.206)$$

где функция

$$P_0(u) = \eta_{\kappa^*, 0}^*(u) \eta_{\kappa^*, 0}(u) \quad (6.207)$$

появляется как одноатомное распределение для равновесного состояния с данными температурой и давлением.

Формфактор смещения

С помощью зонной теории твердых тел можно показать [520], что при $|\kappa| \ll 1$

$$\sum_{\kappa, p} |\langle \kappa, p | u | \kappa^*, 0 \rangle|^2 \propto a_s^2 \frac{\partial^2}{\partial \kappa^2} \Big|_{\kappa=\kappa^*}. \quad (6.208)$$

Подстановка (6.208) в (6.205) приводит к асимптотике $\tilde{Q}_{uu}(\kappa) \propto \kappa^{-2}$ при $\kappa \rightarrow 0$. Гиллан [565] предложил более элегантный метод получения низко-моментной асимптотики. Он использовал связь $\tilde{Q}_{uu}(\kappa)$ с средним значением квадрата флуктуаций относительных смещений L_l ,

$$A_l = \frac{2}{N} \sum_{\kappa} [1 - \cos(\kappa l)] \tilde{Q}_{uu}(\kappa). \quad (6.209)$$

В пределе $N \rightarrow \infty$ мы можем положить $\sum_{\kappa} \rightarrow N \int_{-\pi}^{+\pi} d\kappa/2\pi$. Тогда, подставляя $A_l = \chi a_A^2 |l|$, мы получим уравнение

$$\chi a_A^2 |l| = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} d\kappa [1 - \cos(\kappa l)] \tilde{Q}_{uu}(\kappa). \quad (6.210)$$

Легко видеть, что для $l \rightarrow \infty$ уравнение (6.210) выполняется тогда и только тогда, когда

$$\lim_{\kappa \rightarrow 0} \tilde{Q}_{uu}(\kappa) = \chi a_A^2 / \kappa^2. \quad (6.211)$$

Таким образом, низко-моментное поведение формфактора смещения определяется восприимчивостью χ , которая была вычислена выше. Аналогично можно показать что $Q_{uu}(l) \simeq -\frac{1}{2} \chi a_A^2 |l|$ при $l \rightarrow \pm\infty$.

Формфактор периодических функций

Для периодических функций $A(u)$, корреляционные функции могут демонстрировать два различных типа поведения, зависящие от относительной периодичности $A(u)$ и $V_{\text{sub}}(u)$ [533]. Если $A(u)$ имеет период $a_s = 2\pi$ (или a_s/r , r – целое число), то кинк не меняет асимптотическое значение A и характерной длиной будет только ширина кинка d . ТИ матричный элемент $\langle \kappa, p | \delta A | \kappa^*, 0 \rangle$ связывает ТИ2 основное состояние, $|\kappa^*, 0\rangle$ только с $\kappa = \kappa^*$ состояниями других зон с $p = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Самосоогласование основного состояния $\langle \kappa^*, 0 | \delta A | \kappa^*, 0 \rangle$ обеспечивает “Брэгговский пик”. Если этот матричный элемент исчезает, то формфактор Q_{AA} определяется возбужденными состояниями с $p = \pm 1, \pm 2, \dots$, которые отделены от нижайшего состояния зонными щелями $\simeq p\hbar^* \omega_0$. Согласно уравнению (6.204), вклад от p -th зоны экспоненциально убывает $\propto \exp(-|x|/\xi_p)$ с ростом корреляционной длины

$$\xi_p = a_A / \beta [\epsilon_p(\kappa^*) - \epsilon_0(\kappa^*)] \simeq a_A / \beta p \hbar^* \omega_0 = d/p\theta. \quad (6.212)$$

Таким образом, здесь корреляционная длина остается конечной при $T \rightarrow 0$. В этом случае поведение Q_{AA} может быть объяснено только в терминах фононов, так как корреляция кинков экспоненциально мала. В частности, для случая СГ (то есть при $g \gg 1$ и $\tilde{w} = 0$) при низких температурах $\tau \equiv k_B T / \varepsilon_k \ll 1$ и при больших расстояниях $|x| \gg d$ можно найти корреляционную функцию [519]

$$Q_{cc}(x) \simeq 8\tau^2 \exp(-2|x|/d), \quad (6.213)$$

$$Q_{ss}(x) \simeq 4\tau \exp(-|x|/d), \quad (6.214)$$

$$Q_{s_{1/2}s_{1/2}}(x) \simeq \tau \exp(-|x|/d). \quad (6.215)$$

Функции Q_{cc} и Q_{ss} были также найдены численно Шнейдером и Столлом [520] при помощи ТИ техники.

С другой стороны, если функция $A(u)$ периодична с периодом ra_s (целое число $r \geq 2$), то корреляционная функция Q_{AA} будет уже чувствовать кинк. Для этого случая ТИ матричные элементы в уравнении (6.204) будут ненулевыми когда κ и κ^* лежат в той же самой наименьшей зоне и отличаются на волновой вектор $2\pi/r$. Ясно, что для больших x эти состояния будут доминировать в сумме из уравнения (6.204). Так как они разделены “туннельным расщеплением”, то корреляционная длина ξ будет прямо отражать энергию покоя кинка и ξ будет экспоненциально расти при $T \rightarrow 0$. Действительно, используя приближение сильной связи $\epsilon_0(\kappa) = \epsilon_c - 2t \cos \kappa$, которая допустима при низких температурах, мы найдем, что

$$\epsilon_0(\kappa) - \epsilon_0(\kappa^*) = 2t \{ [1 - \cos(2\pi/r)] \cos \kappa^* + \sin(2\pi/r) \sin \kappa^* \}. \quad (6.216)$$

Используя приближение идеального газа кинков, мы можем положить $t = \langle n_{\text{pair}} \rangle / \beta \langle n \rangle$ и $\kappa^* = \beta a_s \Pi = \beta \mu_w$. Тогда из (6.204) мы при $x = la_a \rightarrow \infty$ получим

$$Q_{AA}(x) \simeq |\langle \kappa^* - (2\pi/r) | \delta A | \kappa^* \rangle|^2 \exp(-|x|/\xi) \cos(x/\xi_{\text{osc}}), \quad (6.217)$$

где

$$\xi^{-1} = \langle n_{\text{tot}} \rangle [1 - \cos(2\pi/r)], \quad (6.218)$$

$$\xi_{\text{osc}}^{-1} = \langle n_w \rangle \sin(2\pi/r). \quad (6.219)$$

Простейшая феноменологическая интерпретация этого поведения состоит в следующем (см. работы [517, 533]), свойством каждого кинка является то, что его прохождение меняет переменную δA , например, из $\pm \delta A_0$ в $\mp \delta A_0$ для случая $r = 2$ (так для $A(u) = \cos \frac{1}{2}u$, $\delta A_0 = 1$). Допуская наличие газа независимых кинков с распределением Пуассона и введя $N_k(x)$ (число кинков на длине x), можно получить что

$$Q_{AA}(x) \simeq \delta A_0^2 \langle (-1)^{N_k(x)} \rangle \simeq \delta A_0^2 \exp(-2\langle n_{\text{tot}} \rangle |x|), \quad (6.220)$$

что совпадает с уравнениями (6.217) – (6.219) для $\tilde{w} = 0$. Таким образом, энергия рождения кинка прямо появляется в корреляционной длине, $\xi \propto \exp(\beta \varepsilon_k)$. Сасаки [563] показал, что кинк-кинковые взаимодействия не влияют на корреляционную длину ($\xi^{-1} = 4\langle n_{\text{pair}} \rangle$ при $\tilde{w} = 0$), но влияют на амплитуду корреляций. Для примера,

$$Q_{c_{1/2}c_{1/2}}(x) \simeq [1 + 8(\bar{\Delta}\langle n_{\text{pair}} \rangle)^2] \exp(-|x|/\xi), \quad (6.221)$$

где $\bar{\Delta}$ задается уравнением (6.102).

6.5.6 Обобщенные ФК модели

В заключение этой главы мы обсудим два обобщения стандартной модели ФК, первое состоит в замене чисто синусоидального потенциала подложки периодическим потенциалом более общей формы, а второе обобщение состоит в использовании негармонических межатомных потенциалов. В силу одномерности ФК модели, любое ее обобщение имеет формально точное ТИ решение, которое может быть использовано для проверки точных результатов. Однако, для понимания физики поведения модели метод газа квазичастиц является более полезным.

Несинусоидальный потенциал подложки

Как было показано выше, при использовании приближения газа квазичастиц задача сводится к вычислению фонон-кинковых фазовых сдвигов, затем к вычислению “ренормализованной” энергии кинка (6.89), и в конце к определению концентрации $\langle n_{\text{pair}} \rangle$ термически возбужденных кинков. Однако, используя общую теорию рассеяния (а именно, свойства функций Йоста), Де Леонардис и Труллингер [568] показали, что точное знание формы кинка и фазовых сдвигов не является необходимым, так как все величины входящие в термодинамические функции могут быть выражены непосредственно через интегралы от функции $V_{\text{sub}}(x)$. Не входя в детали, мы дадим здесь только конечные результаты.

Если x_1 и x_2 координаты двух соседних минимумов потенциала $V_{\text{sub}}(x)$, $V_{\text{sub}}(x_1) = V_{\text{sub}}(x_2) = 0$, а $V_{\text{sub}}(x)$ достигает своего максимума при $x = x_m$, так что барьер между минимумами симметричен относительно этой точки, тогда при $g \gg 1$ и низких температурах ($k_B T \ll \varepsilon_k$)

$$\langle n_{\text{pair}} \rangle = S \left(\frac{2}{\pi} \right)^{1/2} \frac{1}{d} (8\beta\sqrt{g})^{1/2} \exp(-\beta\varepsilon_k), \quad (6.222)$$

где $d = a_s \sqrt{g}$, а независящий от температуры “профильный” множитель S задается выражением

$$S = [(x_2 - x_1)/a_s] \omega_0 \phi, \quad (6.223)$$

где

$$\phi = \frac{1}{2} \exp \left\{ \int_{x_m}^{x_2} dx \left(\frac{1}{\sqrt{2V_{\text{sub}}(x)}} - \frac{1}{x_2 - x} \right) \right\}, \quad (6.224)$$

а $\omega_0^2 = V''_{\text{sub}}(x_2)/m_a$. Если форма кинка $u_{\text{kink}}(x)$ приближается к x_2 согласно асимптотике $|u_{\text{kink}}(x) - x_2| \simeq u_0 \exp(-x/d)$ при $x \rightarrow \infty$, то множитель ϕ будет равен $\phi = u_0/(x_2 - x_1)$. Введем в уравнение (6.222) энергию покоя кинка ε_k для потенциала подложки общей формы, задаваемую уравнением (см. параграф 3.3)

$$\varepsilon_k = \sqrt{g} \int_{x_1}^{x_2} dx \sqrt{2V_{\text{sub}}(x)}. \quad (6.225)$$

Для случая СГ $S = 1$ и мы вновь получаем уравнение (6.93).

Внутренние (профильные) моды. Вначале давайте рассмотрим случай когда потенциал $V_{\text{sub}}(x)$ не имеет дополнительных абсолютных минимумов между x_1 и $x_2 = x_1 + a_s$ (но может иметь относительные минимумы). В этом случае топологическая структура кинков такая же как и для стандартной ФК модели. Однако, в некоторых случаях кинк может иметь дополнительные, одну или более, внутренние степени свободы, так называемые “профильные моды” (см. параграф 3.3.2). Если они имеются, то полное изменение фононных состояний из-за присутствия кинка $\Delta\rho(k)$, задаваемая уравнением (6.86), удовлетворяет теперь теореме Левинсона (или правилу суммированию Фриделя),

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dk \Delta\rho(k) = -(1 + s), \quad (6.226)$$

где s – число профильных мод. Свободная энергия Гельмгольца по прежнему еще задается уравнением (6.68), $F = F_{\text{ph}}^{(0)} - k_B T \langle N_{\text{tot}} \rangle$ для случая нулевого параметра соразмерности, но полная энергия E должна быть переписана в форме

$$E = k_B T [N - (s + 1) \langle N_{\text{tot}} \rangle] + \left(\varepsilon_k + \frac{1}{2} k_B T + s k_B T \right) \langle N_{\text{tot}} \rangle. \quad (6.227)$$

Это значит, что теперь каждый кинк забирает из фононного спектра $(s + 1)$ фононных мод; одна мода трансформируется в голдстоуновскую моду (или в ПН моду в случае дискретной ФК цепочки), а другие s мод становятся профильными модами кинка.

Одним из интересных примеров показывающих существование точно одной профильной моды является двухбарьерный потенциал подложки, когда функция $V_{\text{sub}}(x)$ имеет один локальный минимум посередине между точками x_1 и $x_2 = x_1 + a_s$. В этом случае обычный ФК кинк (2 π -кинки) может быть представлен как связанная пара двух подкинков (π -кинков), а профильная мода соответствует относительным колебаниям положений этих подкинков. Когда глубина локального минимума близка к нулю (то есть, к абсолютному минимуму потенциала $V_{\text{sub}}(x)$), среднее расстояние R между подкинками будет большим, а эффективный потенциал связывающий π -кинки в 2 π -kinck, будет малым. В результате этого, амплитуда относительных колебаний π -кинков может быть достаточно большой даже при низких температурах. Следовательно, здесь мы должны принять во внимание ангармоничность профильной моды [207, 569, 570]. Как можно ожидать с общей точки зрения, ангармоничные поправки будут увеличивать число термически возбужденных кинков (по сравнению с “гармоническим” приближением) с ростом R или T .

Поликинковые системы. Другая ситуация появляется когда потенциал подложки имеет один или более дополнительных абсолютных минимумов между x_1 и $x_2 = x_1 + a_s$, скажем в точке $x = x_0$. В этом случае обычный 2 π -кинк ФК модели расщепляется (“диссоциируется”) на два (или более) независимых подкинков, один “связывает” минимумы x_1 и x_0 , а второй – минимумы x_0 и x_2 (см. параграф 3.3.4). В зависимости от частной формы потенциала $V_{\text{sub}}(x)$, подкинки могут быть названы в одном случае как кинки “большой” и “малый”, или в другом случае как кинки “левый” и “правый”, и так далее. Так как различные типы кинков могут преодолевать различные барьеры, они могут характеризоваться различными энергиями покоя, например, ε_{SK} и ε_{LK} с $\varepsilon_{\text{SK}} < \varepsilon_{\text{LK}}$.

Новым свойством которое появляется в феноменологии газа кинков из-за поликинковости системы является топологическое ограничение на порядок в котором различные типы кинков могут быть последовательно расположены вдоль цепи. Для примера, малый кинк может следовать за малым антикинком или за большим кинком, а не за вторым малым кинком или большим антикинком. Беря это во внимание, можно показать [185, 571, 572], что свободная энергия опять задается уравнением (6.68), где уже нужно использовать

$$\langle N_{\text{tot}} \rangle = \sum_j \langle N_{\text{tot}}^j \rangle, \quad (6.228)$$

индекс j задает различные типы кинков. Выражение для полной энергии E , уравнение (6.227), естественно преобразуется к форме

$$E = k_B T \left[N - \sum_j (s_j + 1) \langle N_{\text{tot}}^j \rangle \right] + \sum_j \left(\varepsilon_k^j + \frac{1}{2} k_B T + s_j k_B T \right) \langle N_{\text{tot}}^j \rangle. \quad (6.229)$$

Заметим, однако, что если кривизны потенциала подложки при разных абсолютных минимумах (например, при $x = x_1$ и $x = x_0$) различны, то существует две (или более) различные фононные ветви, которые дают “усредненный” вклад в фононную свободную энергию $F_{\text{ph}}^{(0)}$ [572].

Концентрация кинков может быть вычислена по формулам (6.222) – (6.225) с соответствующими пределами интегрирования. Так как равновесные концентрации кинков определяются их больцмановскими множителями $\langle n_{\text{pair}}^j \rangle \propto \exp(-\beta \varepsilon_k^j)$, то ясно, что в термодинамических характеристиках (свободная энергия, энтропия и так далее) будут доминировать “малые” кинки (то есть кинки с наименьшей энергией покоя).

С другой стороны, когда происходят смещения атомов, они могут сопровождаться рождением равного числа больших и малых кинков. Например, смещение из 0 в a_s требует одного малого и одного большого кинка. Поэтому очевидно, что число больших кинков будет ограничивающим фактором в, например, формфакторе смещения или при транспорте массы. Для примера, в выражении для восприимчивости χ мы должны заменить величину $\langle N_{\text{tot}} \rangle$ геометрическим средним [185]

$$\frac{1}{\langle N_{\text{tot}}^{\text{av}} \rangle} = \frac{1}{\langle N_{\text{SK,tot}} \rangle} + \frac{1}{\langle N_{\text{LK,tot}} \rangle}. \quad (6.230)$$

Поведение корреляционной функции было изучено в работе [571]. Было показано, что если мы введем функцию “детектирования кинка” $A_j(u_l)$ таким путем, чтобы произведение ее значений в двух ячейках решетки,

а именно $A_j(u_l)A_j(u_{l'})$, было чувствительно к j -тым кинкам между l -тым и l' -тым ячейками, но полностью нечувствительно к другим типам кинков в этой области цепочки, то тогда $Q_{A_j A_j}(x) \propto \exp(-|x|/\xi_j)$, где корреляционная длина ξ_j задается формулой $\xi_j^{-1} = 2\langle n_{\text{tot}}^j \rangle$ в случае нулевого параметра соразмерности.

Ангармоническое межатомное взаимодействие

Когда взаимодействие между атомами является ангармоничным но остается короткодействующим (соответствующая функция выпукла) поведение системы качественно не изменится. Статистическая механика цепочки в этом случае может быть описана так же как и в случае гармонического взаимодействия. Отличие проявляется только в том, что энергия покоя ε_k заменяется арифметическим средним энергии покоя кинка и энергии покоя антикинка, которые различны при нелинейности потенциала межатомного взаимодействия.

Интересное поведение демонстрирует ФК цепь с дальнедействующим взаимодействием когда, например, все атомы в цепи взаимодействуют согласно закону Кац-Бакера

$$V_{\text{int}}(x_l - x_{l'}) = g \frac{(1-r)}{2r} r^{|l-l'|} (u_l - u_{l'})^2, \quad (6.231)$$

где $r = \exp(-\alpha)$, а параметр α^{-1} по существу определяет диапазон взаимодействия. Амплитуда потенциала (6.231) убывает экспоненциально с увеличением межатомного расстояния $x_l - x_{l'} \approx (l-l')a_s$. Модель СГ и модель двойной СГ с взаимодействием (6.231) были изучены Кройтору [290] (см. также работу [573]). Используя технику of Саркера и Крумхансла [288], модель была сведена к эффективной модели, содержащей только взаимодействие ближайших соседей (см. параграф 3.5.3). Энергия покоя кинка ε_k для модели (6.231) стремится к СГ значению если $r \rightarrow 0$, в то время как при $r \rightarrow 1$ мы имеем $\varepsilon_k \rightarrow \infty$. Следовательно, при любом $r < 1$ поведение модели будет подобным поведению стандартной ФК модели. Однако, в Ван-дер-Ваальсовском пределе $r \rightarrow 1$, энергия рождения кинка становится бесконечной, а их концентрация стремится к нулю. Таким образом, при $r \rightarrow 1$ не существует возбудений способных разрушать порядок в цепи. Исследование проведенное в работе [290] показывает, что аналогично одномерной модели Изинга и модели ϕ^4 с дальнедействующим взаимодействием, ФК модель с $r = 1$ также имеет непрерывный фазовый переход порядок-беспорядок, который происходит при *ненулевой* температуре T_c ($k_B T_c = 2\pi^2 g$ если $g \rightarrow 0$ и $k_B T_c = 4g$ когда $g \rightarrow \infty$).

Термализованная динамика

В первых главах книги мы обсуждали свойства изолированной ФК цепи как гамильтоновой системы. Однако, для моделирования реалистических физических объектов необходимо вспомнить, что эффективная ФК модель описывает только часть более полной физической системы и оставшаяся часть, со своими степенями свободы и другими типами возбуждений, может быть учтена косвенно через эффективное поле термостата. В этой главе мы обсудим различные концепции и методы изучения термализованной динамики ФК цепочки.

7.1 Основные концепции и формализмы

Для того чтобы понять необходимость исследования термализованной динамики, мы рассмотрим пример адсорбируемых систем, в которых внешний потенциал $V_{\text{sub}}(x)$ создается атомами на поверхности кристалла. В случае краудина, этот периодический потенциал создается самыми близкими к поверхности рядами атомов металла. Так как положения атомов подложки не являются фиксированными, то в общем случае их движение должно приводить к следующим эффектам:

- (1) Атомы подложки должны чувствовать и отвечать на положение атомов в ФК цепи. Такой “поляронный эффект” приводит к возрастанию амплитуды внешнего потенциала $V_{\text{sub}}(x)$;
- (2) При ненулевой температуре атомы подложки колеблются с некоторыми амплитудами. Это приводит к зависимости амплитуды потенциала подложки ε_s от температуры (эффект Дебая-Воллера);
- (3) Всегда существует обмен энергией между ФК цепью и подложкой. Этот обмен приводит к дополнительному затуханию, то есть к внешнему трению η_{ext} . Для примера в случае цепи адатомов внешнее трение является основным механизмом затухания, $\eta_{\text{ext}} \gg \eta_{\text{int}}$.

Таким образом, подложка играет двойную роль: во-первых, она создает некоторый эффективный внешний потенциал для атомов первичной цепочки описываемых ФК моделью; во-вторых она создает механизм для обмена энергией между атомами ФК цепочки и степенями свободы подложки. Другими словами, ФК цепочка обычно является неконсервативной системой, а подложка играет роль термостата поддерживающего определенную температуру T .

Для описания упомянутых выше механизмов обмена энергии мы должны ввести *эффективную силу трения* действующую на атомы ФК цепочки. В общем случае, сила трения $F_l^{(\text{fr})}$ может быть представлена в следующем виде

$$F_l^{(\text{fr})}(t) = -m_a \sum_{l'} \int_0^\infty d\tau \mathcal{N}_{ll'}(\tau) \dot{x}_{l'}(t - \tau), \quad (7.1)$$

где точка обозначает дифференцирование по времени, а функция реакции

$$\mathcal{N}_{ll'}(\tau) \equiv \mathcal{N}(\dot{x}_l, \ddot{x}_l, \dots, \dot{x}_{l'}, \ddot{x}_{l'}, \dots; \tau) \quad (7.2)$$

является, в общем случае, нелокальной, нелинейной и не марковской. Вычисление этой функции, так же как и решение соответствующих уравнений движения является чрезвычайно сложной задачей. Для упрощения обычно полагают что оператор $\mathcal{N}$ является марковским и локальным, и независимым от положения атома относительно потенциала подложки, то есть $\mathcal{N}_{ll'}(\tau) = 2\eta\delta_{ll'}\delta(\tau)$, так что сила (7.1) сводится к стандартному вязкому трению

$$F_l^{(\text{fr})}(t) = -m_a\eta\dot{x}_l(t). \quad (7.3)$$

Однако, необходимо понимать, что в уравнении (7.3) параметр η в действительности является только “эффективным” коэффициентом трения, который должен быть вычислен путем подходящего усреднения функции реакции по

всем атомным траекториям. Следовательно, в реальных физических системах значение параметра η может быть скорее оценено, чем вычислено точно.

Кроме потока энергии из ФК цепочки в подложку в следствии силы трения (7.3), должен также существовать обратный поток энергии в цепочку, который обычно рассматривают как температуру $T \neq 0$. Этот эффект можно промоделировать введением случайной силы (шума) $\delta F_l(t)$ с нулевым средним значением $\langle \delta F_l(t) \rangle = 0$, действующей на l -тый атом ФК цепочки из подложки. Амплитуда внешнего шума определяется флуктуационно-дисперсионной теоремой, которая гарантирует существование теплового равновесия, то есть равного распределения кинетической энергии между всеми степенями свободы в равновесном состоянии: $\frac{1}{2}m_a \langle \dot{x}_l^2 \rangle = \frac{1}{2}k_B T$. В зависимости от рассматриваемой физической модели, внешний шум может быть аддитивным или/и мультипликативным. Таким образом, задача сводится к анализу динамики ФК цепочки, находящейся под действием случайной силы, которая описывается системой уравнений Ланжевеновского типа.

Далее в этой главе мы рассмотрим низкотемпературную динамику ФК цепочки, когда влияние температуры можно рассматривать как возмущение равновесного состояния. Динамические свойства физических систем достаточно глубоко изучены экспериментально при помощи спектральной техники, в которой непосредственно измеряется динамическая корреляционная функция $Q(k, \omega)$. Функция $Q(k, \omega)$ содержит больше детальной информации о системе чем равновременная корреляционная функция, так как динамическая корреляционная функция имеет пики соответствующие фононным, бризерным и кинковым возбуждениям. Для примера, вклад кинков в $Q(k, \omega)$ приводит к так называемому “центральному пику”, форма которого содержит информацию о механизме движения кинков. Кроме того, реакция системы на малое внешнее возмущение описывает транспортные свойства ФК цепочки, что весьма важно для практических применений модели. Вспомним, что отклонение системы ФК от точно интегрируемой СГ модели часто используется при изучении равновесных свойств модели под действием возмущений. Для динамических характеристик это отклонение играет главную роль, обеспечивая энергетический обмен между различными степенями свободы и определяя тем самым скорость динамических процессов.

Динамические свойства ФК модели очень сложны и обычно могут быть описаны только в рамках некоторого приближенного метода. Заметим однако, что часто единственным способом проверки результатов различных приближенных методов является сравнение их предсказаний с результатами молекулярной динамики.

7.1.1 Основные формулы

Давайте в начале обсудим основную технику используемую при вычислениях динамических корреляционных функций. Для набора динамических переменных

$$\{A_\alpha\}, \quad A_\alpha(t) \equiv A_\alpha(\{z(t)\}), \quad (7.4)$$

где $\{z\} \equiv (z_1, z_2, \dots, z_N)$ обозначает $2N$ -мерный вектор в фазовом пространстве всех атомов, компонента $z_l \equiv (u_l, p_l)$, $p_l = m_a \dot{u}_l$, $l = 1, \dots, N$, корреляционная функция определяется как

$$Q_{\alpha\beta}(t) = \langle \delta A_\alpha^*(t) \delta A_\beta(0) \rangle, \quad \delta A = A - \langle A \rangle. \quad (7.5)$$

Здесь $\langle \dots \rangle$ – обозначение для усреднения по равновесному состоянию,

$$\langle A(z) \rangle = \int d\Gamma A(z) W_{\text{eq}}(z), \quad (7.6)$$

где $d\Gamma = L^{-N} dz_1 \dots dz_N$, $dz_l = du_l dp_l$, and W_{eq} – равновесная функция распределения Максвелла-Больцмана

$$W_{\text{eq}}(z) = R_{\text{eq}}(u_1, \dots, u_N) \prod_{l=1}^N W_M(p_l), \quad (7.7)$$

$$R_{\text{eq}}(u_1, \dots, u_N) = Q_N^{-1} \exp[-\beta U(u_1, \dots, u_N)], \quad (7.8)$$

$$Q_N = L^{-N} \int du_1 \dots du_N e^{-\beta U}, \quad (7.9)$$

$$W_M(p) = (2\pi m_a k_B T)^{-1/2} \exp(-\beta p^2 / 2m_a), \quad (7.10)$$

$\beta \equiv (k_B T)^{-1}$, а $U = U_{\text{sub}} + U_{\text{int}}$ – полная потенциальная энергия системы.

Если система находится в контакте с термостатом, то временная эволюция системы будет задаваться набором уравнений Ланжевена

$$m_a \ddot{u}_l + m_a \eta \dot{u}_l - F_l = \delta F_l(t), \quad (7.11)$$

где параметр η описывает скорость обмена энергии между системой и термостатом, $F_l = -\partial U/\partial u_l = F_l^{(\text{sub})} + F_l^{(\text{int})}$, а флуктуирующая сила δF_l удовлетворяет условиям нормировки $\langle \delta F_l(t) \rangle = 0$ и $\langle \delta F_l(t) \delta F_{l'}(t') \rangle = 2\eta m_a k_B T \delta_{ll'} \delta(t-t')$. Уравнение (7.11) эквивалентно уравнению Фоккера-Планка-Краммера (ФПК) для функции распределения $W(z, t|z', 0)$, которая описывает вероятность перехода из конфигурации z' в момент времени $t = 0$ в конфигурацию z в момент времени t (см., например, монографию [574])

$$\dot{W}(z; t|z'; 0) = \mathcal{L}(z) W(z; t|z', 0), \quad (7.12)$$

где ФПК эволюционный оператор задается выражением

$$\mathcal{L}(z) \equiv \sum_l \left[-\frac{p_l}{m_a} \frac{\partial}{\partial u_l} - F_l \frac{\partial}{\partial p_l} + \eta \frac{\partial}{\partial p_l} \left(p_l + m_a k_B T \frac{\partial}{\partial p_l} \right) \right]. \quad (7.13)$$

В случае большой вязкости, $\eta \gg \omega_{\max}$, где $\omega_{\max}$ – максимальная частота колебаний в системе, мы можем опустить в уравнении (7.11) инерционный член и уравнение ФПК сведется к уравнению Смолуховского [575]–[577]

$$\dot{R}(\{u\}; t|\{u'\}; 0) = \mathcal{L}_{\text{sm}}(\{u\}) R(\{u\}; t|\{u'\}; 0), \quad (7.14)$$

$$\mathcal{L}_{\text{sm}}(\{u\}) \equiv D_f \sum_l \left(-\beta \frac{\partial}{\partial u_l} F_l + \frac{\partial^2}{\partial u_l^2} \right) = D_f \sum_l \frac{\partial}{\partial x_l} e^{-\beta U} \frac{\partial}{\partial x_l} e^{+\beta U}, \quad (7.15)$$

где $D_f \equiv k_B T / m_a \eta$. Функции W и R связаны соотношением

$$W(z; t|\dots) = \left[\prod_{l=1}^N W_M(p_l) \right] \left[1 + \sum_l \frac{p_l}{m_a \eta} \left(\beta F_l - \frac{\partial}{\partial x_l} \right) \right] R(\{u\}; t|\dots). \quad (7.16)$$

Определяя функцию Грина W_G как решение уравнения ФПК с начальным условием $W_G(z; t|z'; 0)|_{t=0} = \delta(z - z')$, корреляционную функцию (7.5) можно представить в виде

$$Q_{\alpha\beta}(t) = \int d\Gamma d\Gamma' \delta A_\alpha^*(z) W_G(z; t|z'; 0) \delta A_\beta(z') W_{\text{eq}}(z'). \quad (7.17)$$

Удобно также ввести редуцированные распределения $W^{(s)}$ согласно уравнению

$$W^{(s)}(z_1, \dots, z_s; t|\dots) = L^{-(N-s)} \int dz_{s+1} \dots dz_N W(z_1, \dots, z_N; t|\dots), \quad (7.18)$$

где $1 \leq s \leq N$ и $W^{(N)} \equiv W$. Редуцированные распределения нормализованы условием

$$L^{-s} \int dz_1 \dots dz_s W^{(s)} = 1. \quad (7.19)$$

Определим также корреляционные распределения $\Phi^{(s)}$ как

$$W^{(2)}(z_1, z_2; t) = W^{(1)}(z_1; t) W^{(1)}(z_2; t) + \Phi^{(2)}(z_1, z_2; t), \quad (7.20)$$

$$\begin{aligned} W^{(3)}(123) &= W^{(1)}(1) W^{(1)}(2) W^{(1)}(3) + W^{(1)}(1) \Phi^{(2)}(23) \\ &+ W^{(1)}(2) \Phi^{(2)}(31) + W^{(1)}(3) \Phi^{(2)}(12) + \Phi^{(3)}(123), \end{aligned} \quad (7.21)$$

и т.д.. Уравнения движения для функций $W^{(s)}$ формируют систему N связанных уравнений, известную как иерархия (цепочка) уравнений ББГКИ, приближенное решение которой обычно получается обрезанием цепи на некотором шаге r условием $\Phi^{(s)} = 0$ для всех $s \geq r$. Когда динамическая переменная A зависит только от координаты единственного атома, т.е. $A = A(z_l)$, то соответствующая корреляционная функция будет выражаться через первые два приведенные распределения

$$\begin{aligned} Q_{AA}(l, l'; t) &= \frac{\delta_{ll'}}{L^2} \int dz^2 \delta A^*(z_l) W_G^{(1)}(z_l; t|z'_l; 0) \delta A(z'_l) W_{\text{eq}}^{(1)}(z'_l) \\ &+ \frac{(1 - \delta_{ll'})}{L^4} \int dz^4 \delta A^*(z_l) \Phi_G^{(2)}(z_l, z_{l'}; t|z'_l, z'_{l'}; 0) \delta A(z'_{l'}) W_{\text{eq}}^{(2)}(z'_l, z'_{l'}), \end{aligned}$$

где $dz^2 = dz_l dz'_l$ и $dz^4 = dz_l dz_{l'} dz'_l dz'_{l'}$.

7.1.2 Метод Мори

При исследовании транспортных свойств необходимо вычислить функцию

$$\bar{Q}(\bar{\omega}) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi i} \frac{\hat{Q}(\omega)}{\omega - \bar{\omega}}, \quad \text{Im } \bar{\omega} \neq 0, \quad (7.22)$$

где $\hat{Q}(\omega)$ – преобразование Фурье корреляционной функции от времени,

$$\hat{Q}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} Q(t). \quad (7.23)$$

Функция $\bar{Q}(\bar{\omega})$ аналитична на целой комплексной плоскости $\bar{\omega}$ с разрезом вдоль действительной оси; в верхней полуплоскости $\bar{Q}(\bar{\omega})$ совпадает с обычным преобразованием Лапласа функции $Q(t)$,

$$\bar{Q}(\bar{\omega}) = \int_0^{+\infty} dt e^{i\bar{\omega}t} Q(t), \quad \text{Im } \bar{\omega} > 0. \quad (7.24)$$

Функция Грина W_G может быть формально введена соотношением

$$W_G(z; t|z'; 0) = \exp[\mathcal{L}(z) t] \delta(z - z'). \quad (7.25)$$

Используя уравнения (7.17) и (7.25), корреляционная функция (7.5) может быть переписана как

$$\begin{aligned} Q_{\alpha\beta}(t) &= \langle \delta A_{\alpha}^*(0) \delta A_{\beta}(-t) \rangle \\ &= \int d\Gamma d\Gamma' \delta A_{\alpha}^*(z) \left[e^{-\mathcal{L}(z')t} \delta(z - z') \right] \delta A_{\beta}(z') W_{\text{eq}}(z). \end{aligned} \quad (7.26)$$

Интегрируя по частям интеграл по $d\Gamma'$ (см. детали в монографию [574]), мы получим, что

$$Q_{\alpha\beta}(t) = \int d\Gamma d\Gamma' \delta A_{\alpha}^*(z) \delta(z - z') \left[e^{-\mathcal{L}^+(z')t} \delta A_{\beta}(z') \right] W_{\text{eq}}(z), \quad (7.27)$$

где сопряженный оператор $\mathcal{L}^+$ соответствует обратной эволюции W согласно уравнению Колмогорова

$$\dot{W}(z; t|z'; 0) = \mathcal{L}^+(z') W(z; t|z'; 0). \quad (7.28)$$

Для уравнения ФПК оператор $\mathcal{L}^+$ имеет форму

$$\mathcal{L}^+(z) \equiv \sum_l \left[\frac{p_l}{m_a} \frac{\partial}{\partial u_l} + F_l \frac{\partial}{\partial p_l} + \eta \left(-p_l \frac{\partial}{\partial p_l} + m_a k_B T \frac{\partial^2}{\partial p_l^2} \right) \right] \quad (7.29)$$

и в сверхвязком случае, уравнение принимает форму

$$\mathcal{L}_{\text{sm}}^+(\{u\}) \equiv D_f \sum_l \left(\beta F_l \frac{\partial}{\partial u_l} + \frac{\partial^2}{\partial u_l^2} \right) = D_f \sum_l e^{+\beta U} \frac{\partial}{\partial x_l} e^{-\beta U} \frac{\partial}{\partial x_l}. \quad (7.30)$$

Теперь, определяя скалярное произведение двух функций $A(z)$ и $B(z)$ как

$$\langle A|B \rangle \equiv \langle A^* B \rangle \equiv \int d\Gamma A^*(z) B(z) W_{\text{eq}}(z), \quad (7.31)$$

корреляционную функцию (7.27) можно переписать в виде

$$Q_{\alpha\beta}(t) = \langle \delta A_{\alpha} | e^{-\mathcal{L}^+ t} \delta A_{\beta} \rangle. \quad (7.32)$$

Преобразование Лапласа уравнения (7.32)

$$\bar{Q}_{\alpha\beta}(\bar{\omega}) = i \langle \delta A_{\alpha} | (\bar{\omega} + i\mathcal{L}^+)^{-1} \delta A_{\beta} \rangle. \quad (7.33)$$

Функцию (7.33) можно теперь вычислить с помощью Цванциг-Мори техники [578]–[581] (см. также часть V книги [582]). А именно, введя оператор проекции

$$\mathcal{P} = \sum_{\alpha, \beta} |\delta A_\alpha\rangle [Q^{-1}(0)]_{\alpha\beta} \langle \delta A_\beta|, \quad (7.34)$$

где

$$Q_{\alpha\beta}(0) \equiv \langle \delta A_\alpha | \delta A_\beta \rangle = Q_{\alpha\beta}(t)|_{t=0}, \quad (7.35)$$

матрица (7.33) может быть представлена в следующей форме,

$$\bar{Q}(\bar{\omega}) = i\{\bar{\omega} - [\Omega + M(\bar{\omega})]\}^{-1} Q(0). \quad (7.36)$$

Здесь $\Omega = -i\langle \mathcal{L}^+ \delta A | \delta A \rangle Q^{-1}(0)$, а M – так называемая функция памяти,

$$M(\bar{\omega}) = \langle \delta A | (i\mathcal{L}^M)(\bar{\omega} + i\mathcal{L}^M)^{-1}(i\mathcal{L}^M) | \delta A \rangle Q^{-1}(0), \quad (7.37)$$

где $\mathcal{L}^M = (1 - \mathcal{P})\mathcal{L}^+(1 - \mathcal{P})$.

7.1.3 Коэффициенты диффузии

Диффузионные свойства системы определяются корреляционной функцией скорости

$$Q_{\dot{u}\dot{u}}(l - l'; t) = \langle \dot{u}_l(t) \dot{u}_{l'}(0) \rangle. \quad (7.38)$$

Как обычно, сделаем преобразования Фурье по пространственным координатам,

$$\tilde{u}(\kappa, t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{l=1}^N e^{-i\kappa l} u_l(t) = \tilde{u}^*(-\kappa, t), \quad |\kappa| \leq \pi, \quad (7.39)$$

так что

$$\tilde{Q}_{\dot{u}\dot{u}}(\kappa; t) = \langle \dot{\tilde{u}}(-\kappa; t) \dot{\tilde{u}}(\kappa; 0) \rangle = \sum_l e^{i\kappa l} Q_{\dot{u}\dot{u}}(l; t). \quad (7.40)$$

Заметим, что преобразования Лапласа корреляционных функций скорости и смещений связаны соотношением

$$\bar{Q}_{\dot{u}\dot{u}}(l; \bar{\omega}) = \bar{\omega}^2 \bar{Q}_{uu}(l; \bar{\omega}), \quad (7.41)$$

которое следует из уравнения

$$Q_{\dot{u}\dot{u}}(l; t - t') = \frac{\partial^2}{\partial t \partial t'} Q_{uu}(l; t - t').$$

Теперь мы можем ввести следующие коэффициенты диффузии.

(а) *Коэффициент самодиффузии* D_s определен как

$$D_s = \lim_{\bar{\omega} \rightarrow 0+i0} \bar{\mathcal{D}}_s(\bar{\omega}), \quad (7.42)$$

где $\bar{\mathcal{D}}_s(\bar{\omega})$ – преобразование Лапласа функции

$$\mathcal{D}_s(t) = Q_{\dot{u}\dot{u}}(0; t) = \frac{1}{N} \sum_{\kappa} \tilde{Q}_{\dot{u}\dot{u}}(\kappa; t). \quad (7.43)$$

Когда $D_s \neq 0$, коэффициент самодиффузии определяет средне-квадратическое смещение данного атома на долговременной шкале

$$\langle [u_l(t) - u_l(0)]^2 \rangle \simeq 2D_s t, \quad t \rightarrow \infty. \quad (7.44)$$

Функция $\bar{\mathcal{D}}_s(\bar{\omega})$ описывает некогерентные эксперименты рассеяния.

(б) *Коэффициент коллективной диффузии* D_μ вводится как

$$D_\mu = \lim_{\bar{\omega} \rightarrow 0+i0} \mathcal{D}_\mu(\bar{\omega}), \quad (7.45)$$

$\bar{\mathcal{D}}_\mu(\bar{\omega})$ – преобразование Лапласа функции

$$\mathcal{D}_\mu(t) = \sum_{l=1}^N Q_{\dot{u}\dot{u}}(l; t) = \lim_{\kappa \rightarrow 0} \tilde{Q}_{\dot{u}\dot{u}}(\kappa; t). \quad (7.46)$$

Так как $\mathcal{D}_\mu(t)$ можно переписать в виде

$$\mathcal{D}_\mu(t) = Q_{\dot{Y}\dot{Y}}(t), \quad (7.47)$$

где

$$Y(t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_l u_l(t), \quad (7.48)$$

то коэффициент D_μ описывает долговременные динамики центра масс цепи

$$\langle [Y(t) - Y(0)]^2 \rangle \simeq 2D_\mu t, \quad t \rightarrow \infty. \quad (7.49)$$

Из определений (7.43) и (7.46) следует, что

$$\mathcal{D}_\mu(t) = \mathcal{D}_s(t) + \frac{1}{N} \sum_{l \neq l'} \langle \dot{u}_l(t) \dot{u}_{l'}(0) \rangle. \quad (7.50)$$

Таким образом, функция $\mathcal{D}_\mu(t)$ включает коррелированное движение взаимодействующих атомов; в результате этого обычно $D_\mu > D_s$. Так как обе функции $\mathcal{D}_s(t)$ и $\mathcal{D}_\mu(t)$ являются действительными и четными, то мы имеем

$$\widehat{\mathcal{D}}_\nu(\omega) = \widehat{\mathcal{D}}_\nu^*(-\omega) = \pm 2 \operatorname{Re} \bar{\mathcal{D}}_\nu(\omega \pm i0), \quad \nu = s, \mu, \quad (7.51)$$

и

$$D_\nu = \frac{1}{2} \lim_{\omega \rightarrow 0} \widehat{\mathcal{D}}_\nu(\omega), \quad \nu = s, \mu. \quad (7.52)$$

Коэффициент D_μ связан с коэффициентом подвижности B соотношением Эйнштейна. А именно, функция

$$B(t) = \begin{cases} \beta \mathcal{D}_\mu(t), & \text{if } t \geq 0, \\ 0, & \text{if } t < 0 \end{cases} \quad (7.53)$$

описывает линейный отклик цепи на малую внешнюю силу $F(t)$ действующую на каждый атом:

$$\langle j(t) \rangle = \int_0^{+\infty} d\tau B(\tau) F(t - \tau), \quad F \rightarrow 0, \quad (7.54)$$

где $j(t) = N^{-1} \sum_{l=1}^N \dot{u}_l(t)$ – скорость атомов усредненная по цепи. Из уравнений (7.53), (7.54) мы видим, что $B(t)$ является обобщенной восприимчивостью и поэтому ее можно вычислить при помощи метода Кубо [583, 584]. Определив поток атомов уравнением

$$J(x, t) = \sum_l \dot{u}_l(t) \delta(x - x_l(t)), \quad (7.55)$$

мы получим, что сила $F(t)$ приводит к усредненному потоку $\langle J(t) \rangle = n \langle j(t) \rangle$. Таким образом, когда частицы составляющие ФК цепь имеют электрический заряд e , частотно-зависимая проводимость цепи равна

$$\sigma(\omega) = ne^2 \widehat{B}(\omega), \quad \widehat{B}(\omega) = \beta \bar{\mathcal{D}}_\mu(\omega + i0). \quad (7.56)$$

(с) Коэффициент химической диффузии D_c определяется соотношением

$$D_c = D_\mu / \chi, \quad (7.57)$$

где χ – статистическая восприимчивость изученная выше в параграфе 6.5.3. Коэффициент D_c определяет поток атомов в неравновесном состоянии, когда концентрация атомов отклоняется от равновесного значения n . А именно, когда плотность атомов

$$\rho(x, t) = \sum_l \delta(x - x_l(t)) \quad (7.58)$$

медленно отклоняется от равновесной плотности $\rho_{\text{eq}}(x)$, поток атомов равен

$$\langle\langle J(x, t) \rangle\rangle \simeq -D_c \frac{\partial}{\partial x} \langle\langle \rho(x, t) \rangle\rangle. \quad (7.59)$$

Здесь символ $\langle\langle \dots \rangle\rangle$ обозначает усреднение по микроскопическому расстоянию большему a . Уравнение (7.59) известно как первый закон Фика. Если мы здесь применим преобразования Фурье и Лапласа по x и t , то есть возьмем

$$\tilde{\rho}(k, \bar{\omega}) = \int_0^{+\infty} dt e^{i\bar{\omega}t} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-ikx} \rho(x, t), \quad (7.60)$$

то уравнение (7.59) примет форму $\tilde{J}(k\bar{\omega}) \simeq ikD_c \tilde{\rho}(k, \bar{\omega})$. Это уравнение становится точным в пределе $k \rightarrow 0$, $\bar{\omega} \rightarrow 0 + i0$, который называется гидродинамическим режимом.

7.1.4 Невзаимодействующие атомы

Для системы не взаимодействующих атомов, $V_{\text{int}} \equiv 0$, все коэффициенты диффузии совпадают,

$$\mathcal{D}_s(t) = \mathcal{D}_\mu(t) = \mathcal{D}(t), \quad D_s = D_\mu = D_c = D. \quad (7.61)$$

В частности, для тривиального случая свободного газа броуновских частиц, когда $V_{\text{sub}}(x) \equiv 0$, мы имеем

$$\bar{\mathcal{D}}(\bar{\omega}) = \bar{\mathcal{D}}_f(\bar{\omega}) \equiv D_f (1 - i\bar{\omega}/\eta)^{-1}, \quad D = D_f \equiv k_B T / m_a \eta. \quad (7.62)$$

Однако, когда $V_{\text{sub}}(x) \neq 0$, точное решение известно только для двух предельных случаев. Первый, это случай сверхвязкости $\eta \rightarrow \infty$ в котором коэффициент диффузии равен [585]–[589]

$$D = D_f \left\{ \left(\int_0^{a_s} \frac{dx}{a_s} e^{-\beta V_{\text{sub}}(x)} \right) \left(\int_0^{a_s} \frac{dx}{a_s} e^{+\beta V_{\text{sub}}(x)} \right) \right\}^{-1}. \quad (7.63)$$

Для синусоидального потенциала подложки уравнение (7.63) приводит к

$$D = \frac{D_f}{I_0^2(\beta \varepsilon_s / 2)} \simeq \begin{cases} D_f (1 - \frac{1}{8} \beta^2 \varepsilon_s^2) & \text{для } k_B T \gg \varepsilon_s, \\ (\pi \varepsilon_s / m_a \eta) \exp(-\beta \varepsilon_s) & \text{для } k_B T \ll \varepsilon_s. \end{cases} \quad (7.64)$$

Второй, это случай отсутствия вязкости, т.е. предел $\eta \rightarrow 0$. Здесь D определяется соотношением [590, 591]

$$D = D_f \left(\frac{2}{\pi m_a k_B T} \right)^{1/2} \left(\int_{\varepsilon_s}^{\infty} \frac{dE}{\langle v(E) \rangle} e^{-\beta E} \right) \left(\int_0^{a_s} \frac{dx}{a_s} e^{-\beta V_{\text{sub}}(x)} \right)^{-1}, \quad (7.65)$$

где

$$\langle v(E) \rangle = \int_0^{a_s} \frac{dx}{a_s} \left| \left(\frac{2}{m_a} [E - V_{\text{sub}}(x)] \right)^{1/2} \right|. \quad (7.66)$$

Для синусоидального потенциала $V_{\text{sub}}(x)$, уравнение (7.65) приводит к результату [591]

$$D = D_f \frac{\sqrt{\pi \beta \varepsilon_s} \exp(-\beta \varepsilon_s / 2)}{2 I_0(\beta \varepsilon_s / 2)} \int_0^{+\infty} dt \frac{e^{-\beta \varepsilon_s t}}{\sqrt{1 + t \mathbf{E}(1/\sqrt{1+t})}} \quad (7.67)$$

$$\simeq (\pi/2) D_f \exp(-\beta \varepsilon_s) \quad k_B T \ll \varepsilon_s. \quad (7.68)$$

В случае сильного трения значение D может быть представлена как степенной ряд от η^{-1} [592]–[594], в то время как в случае слабого трения – в виде ряда от $\sqrt{\eta}$ [591, 595, 596]. Для промежуточных значений η коэффициент диффузии был получен численно [595], [597]–[602].

Для низкой температуры, т.е. при $k_B T \ll \varepsilon_s$, значение D может быть представлено в форме Аррениуса,

$$D = \mathcal{R} \lambda^2, \quad \mathcal{R} = \mathcal{R}_0 \exp(-\beta \varepsilon_s), \quad (7.69)$$

где $\mathcal{R}$ – скорость ухода атома из дна потенциальной ямы, а λ – среднее расстояние прыжков атома. Предэкспоненциальный множитель $\mathcal{R}_0$ в уравнении (7.69) может быть получен при помощи теории Крамерса [603, 604]

$$\mathcal{R}_0 \simeq \begin{cases} \beta \varepsilon_s \eta & \text{если } \eta < \eta_l \equiv \omega_0 / 2\pi \beta \varepsilon_s, \\ \omega_0 / 2\pi & \text{если } \eta_l < \eta < \omega_*, \\ \omega_0 \omega_* / 2\pi \eta & \text{если } \eta > \omega_*, \end{cases} \quad (7.70)$$

где $\omega_0^2 = V''_{\text{sub}}(0)/m_a$, а $\omega_*^2 = -V''_{\text{sub}}(\frac{1}{2}a_s)/m_a$. Величина λ может быть оценена как [605]

$$\lambda \simeq \begin{cases} a_s \eta_l / \eta & \text{если } \eta < \eta_l, \\ a_s & \text{если } \eta > \eta_l. \end{cases} \quad (7.71)$$

Заметим, что для $\eta_l < \eta < \omega_*$ коэффициент диффузии $D \simeq a_s^2 (\omega_0 / 2\pi) e^{-\beta \varepsilon_s}$, то есть он не зависит от значения трения η . Это свойство определяет область применимости теории переходных состояний.

7.1.5 Взаимодействующие атомы

Если атомы взаимодействуют между собой, то все коэффициенты диффузии будут разными и все они будут зависеть от концентрации атомов n . Роль взаимодействия сводится к следующим факторам:

- (i) Взаимодействие создает некоторый порядок в расположении атомов (в одномерной системе этот порядок будет короткодействующим). Это явление проявляется в неравенстве $\chi \neq 1$ и, следовательно, в неравенстве $D_c(n) \neq D_\mu(n)$ если $n \neq 0$;
- (ii) Каждый атом чувствует потенциал создаваемый остальными атомами и поэтому эффективный потенциал для данного атома будет зависеть от положения соседних атомов. В результате этого оба коэффициента диффузии D_s и D_μ будут функциями от n . Такая зависимость является эффектом первого порядка от V_{int} и приближенно может быть описана в рамках методов теории среднего поля;
- (iii) Движение данного атома вызывает движение соседних атомов. Такое коллективное движение (иногда также называемое *concerned*, или согласованным, или эстафетным движением) является аналогом “поляронного” эффекта в теории твердого тела. Оно проявляется в том, что $D_s(n) \neq D_\mu(n)$ если $n \neq 0$ (обычно $D_s < D_\mu$). При низких температурах это коллективное движение может быть описано как движение одного целого объекта – кинка. Так, когда кинк состоит из r атомов ($r \approx d/a_s = \sqrt{g}$), цепочка ББГКИ уравнений движения должна быть усечена в минимальном приближении на r -том шаге. Следовательно, в этом случае феноменологический подход является более подходящим;
- (iv) Из за неинтегрируемости модели ФК, движение атомов всегда сопровождается энергетическим обменом между разными модами приводящем к внутренней хаотизации их динамики. Учет этого эффекта является очень сложной задачей. Приближенно его можно учесть если допустить, что коэффициент трения η учитывает и внутреннее трение η_{int} , то есть $\eta = \eta_{\text{ext}} + \eta_{\text{int}}$.

Первые два фактора (i) и (ii) имеют статическую природу, а два последних фактора (iii) и (iv) являются чисто динамическими.

Корректный учет V_{int} в рассмотрении динамики системы является очень сложной задачей даже в случае $V_{\text{sub}} \equiv 0$. При высоких температурах теория возмущения основывается на обычно используемой технике Мори. Ниже мы кратко опишем главные подходы к этой задаче.

Применяя многократно процедуру Мори, корреляционную функцию можно представить в виде непрерывной дроби [606, 607]. В частности, для корреляционной функции $Q_{\dot{Y}\dot{Y}}$ эта процедура дает [608]

$$\bar{D}_\mu(\bar{\omega}) = D_f \frac{\eta}{-i\bar{\omega} + b_1 + \frac{c_1}{-i\bar{\omega} + b_2 + \dots + \frac{c_p}{-i\bar{\omega} + \Delta_{p+1}(\bar{\omega})}}}, \quad (7.72)$$

где

$$\begin{aligned} b_1 &= \eta, \\ b_2 &= 0, \\ &\dots, \\ c_1 &= (\beta/m_a N) \sum_{ll'} \langle F_l^{(\text{sub})} F_{l'}^{(\text{sub})} \rangle, \\ c_2 &= (c_1 m_a^2 N)^{-1} \sum_l \left[\left\langle \left(F_l'^{(\text{sub})} \right)^2 \right\rangle - \left\langle F_l'^{(\text{sub})} \right\rangle^2 \right], \end{aligned} \quad (7.73)$$

и т.д., где

$$F_l'^{(\text{sub})} = -\frac{\partial^2 U_{\text{sub}}}{\partial x_l^2}.$$

Заметим, что межатомный потенциал V_{int} не встречается явно в уравнениях (7.73), он только проявляется в средних значениях по стационарному распределению W_{eq} . Средние в $c_1, c_2, \dots$ могут быть вычислены, например, при помощи ТИ техники. В численных вычислениях непрерывная дробь (7.72) должна быть обрезана. Гейзель [608] использовал обрезание при $p = 2$ положив значение $\Delta_3 = \eta$, которое дает аккуратные результаты для достаточно высоких температур ($\beta\epsilon_s \ll 2$) в пределе больших дробей. Для стандартной ФК модели коэффициенты c_1 и c_2 , при использовании теории возмущения второго порядка от $\beta\epsilon_s$, равны [608]

$$c_1 = \frac{\beta\epsilon_s^2}{8m_a} \left(\frac{2\pi}{a_s} \right)^2 \frac{\sinh(2\pi^2/\beta g a_s^2)}{\cosh(2\pi^2/\beta g a_s^2) - \cos(2\pi a_A/a_s)}, \quad (7.74)$$

$$c_2 = \frac{1}{8c_1} \left(\frac{\epsilon_s}{m_a} \right)^2 \left(\frac{2\pi}{a_s} \right)^4. \quad (7.75)$$

Затем, мы введем корреляционные функции

$$G_\nu^W(x, p; x', p'; t) = \langle \delta f_\nu(x, p, t) \delta f_\nu(x', p', 0) \rangle, \quad \nu = s, \mu \quad (7.76)$$

для набора динамических переменных

$$f_s(x, p, t) = f(x, p; z_l(t)) \equiv \delta(x - x_l(t)) \delta(p - p_l(t)) \quad (7.77)$$

и

$$f_\mu(x, p, t) = N^{-1/2} \sum_{l=1}^N f(x, p; z_l(t)). \quad (7.78)$$

Тогда коэффициенты диффузии могут быть вычислены как

$$\bar{D}_\nu(\bar{\omega}) = m_a^{-2} \lim_{k \rightarrow 0} \int dp dp' pp' \tilde{G}_\nu^W(k, p; k, p'; \bar{\omega}), \quad \nu = s, \mu, \quad (7.79)$$

где $\tilde{G}$ пространственное преобразование Фурье функции G ,

$$\tilde{G}(k, p; k', p'; t) = \int dx dx' e^{-ikx + ik'x'} G(x, p; x', p'; t). \quad (7.80)$$

Заметим, что переменные k и k' в $\tilde{G}$ изменяются в интервале $(-\infty, +\infty)$; их не надо смешивать с волновым вектором κ в функции $\tilde{Q}$, значения которого ограничиваются первой зоной Бриллюэна, $|\kappa| \leq \pi$.

Используя технику Мори, Мунаката и Тсуруи [609] получили следующие приближенные уравнения для функций G_ν^W :

$$\dot{G}_\nu^W(x, p; x', p'; t) = \mathcal{L}_\nu(x, p) G_\nu^W(x, p; x', p'; t), \quad \nu = s, \mu, \quad (7.81)$$

где

$$\mathcal{L}_s(x, p) = -\frac{p}{m_a} \frac{\partial}{\partial x} - F_{\text{eff}}^{(\text{sub})}(x) \frac{\partial}{\partial p} + \eta \frac{\partial}{\partial p} \left(p + m_a k_B T \frac{\partial}{\partial p} \right), \quad (7.82)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_\mu(x, p) G_\mu^W(x, p; x', p'; t) &= \mathcal{L}_s(x, p) G_\mu^W(x, p; x', p'; t) \\ &- \frac{\partial}{\partial p} \rho_{\text{eq}}(x) W_M(p) \int dx'' dp'' F_{\text{eff}}^{(\text{int})}(x, x'') G_\mu^W(x'', p'', x', p'; t). \end{aligned} \quad (7.83)$$

Здесь $\rho_{\text{eq}}^{(x)}$ – равновесная плотность атомов,

$$\rho_{\text{eq}}(x) = \left\langle \sum_{l=1}^N \delta(x - x_l) \right\rangle, \quad (7.84)$$

$F_{\text{eff}}^{(\text{sub})}(x) = -\frac{\partial}{\partial x} V_{\text{sub}}^{\text{eff}}(x)$, эффективный потенциал подложки определяется уравнением

$$\rho_{\text{eq}}(x) = n \exp[-\beta V_{\text{sub}}^{\text{eff}}(x)] \left\{ \int_0^{a_s} \frac{dx}{a_s} \exp[-\beta V_{\text{sub}}^{\text{eff}}(x)] \right\}^{-1}, \quad (7.85)$$

а эффективное межатомное взаимодействие в уравнении (7.83) вводится как

$$\beta F_{\text{eff}}^{(\text{int})}(x, x') = \frac{\partial}{\partial x} \phi(x, x'), \quad (7.86)$$

где $\phi(x, x')$ – прямая корреляционная функция для неоднородной системы. Функция $\phi(x, x')$ удовлетворяет интегральному уравнению

$$\phi(x, x') = \psi(x, x') - \int dx'' \phi(x, x'') \rho_{\text{eq}}(x'') \psi(x'', x'), \quad (7.87)$$

где $\psi(x, x')$ определяется парным корреляционным распределением введенном в уравнении (7.21),

$$\psi(x, x') = \int dp dp' \Phi_{\text{eq}}^{(2)}(x, p; x', p') \left[R_{\text{eq}}^{(1)}(x) R_{\text{eq}}^{(1)}(x') \right]^{-1}. \quad (7.88)$$

Таким образом, межатомное взаимодействие ренормализует внешний потенциал подложки $V_{\text{sub}} \rightarrow V_{\text{sub}}^{\text{eff}}$, а также приводит к изменению парных взаимодействий из-за появления в уравнении (7.83) для функции G_μ члена обусловленного эффектом среднего поля.

Согласно уравнению (7.41), коэффициенты диффузии могут быть выражены через корреляционную функцию смещения. Используя следующие простые соотношения

$$\delta u_l = \delta x_l = \delta \left\{ \int dx x \delta(x - x_l) \right\} = \delta \left\{ i \lim_{k \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial k} \int dx e^{-ikx} \delta(x - x_l) \right\}, \quad (7.89)$$

уравнение (7.79) может быть переписано в форме

$$\bar{D}_\nu(\bar{\omega}) = \bar{\omega}^2 \lim_{k, k' \rightarrow 0} \frac{\partial^2}{\partial k \partial k'} \bar{G}_\nu^R(k, k'; \bar{\omega}), \quad \nu = s, \mu, \quad (7.90)$$

где приведенная корреляционная функция

$$G_\nu^R(x, x'; t) = \langle \delta \varphi_\nu(x, t) \delta \varphi_\nu(x', 0) \rangle, \quad \nu = s, \mu \quad (7.91)$$

определена для переменных

$$\varphi_\nu(x, t) = \int dp f_\nu(x, p, t), \quad \nu = s, \mu, \quad (7.92)$$

так что $\varphi_s(x, t) = \delta(x - x_l(t))$ и $\varphi_\mu(x, t) = N^{-1/2} \sum_l \delta(x - x_l(t))$. Заметим также, что $\langle \varphi_\mu(x, t) \rangle = N^{-1/2} \rho_{\text{eq}}(x)$, и что функция $F(k, t) \equiv \tilde{G}_\mu^R(k, k; t)$ называется промежуточной функцией рассеяния. Так как

$$\tilde{G}^R(k, k'; t) \propto \text{Const}(t) k k' + O(k^3),$$

уравнение (7.90) может быть переписано в форме

$$\bar{D}_\nu(\bar{\omega}) = \frac{1}{2} \bar{\omega}^2 \lim_{k \rightarrow 0} \frac{\partial^2}{\partial k^2} \bar{G}_\nu^R(k, k; \bar{\omega}), \quad \nu = s, \mu. \quad (7.93)$$

Используя представление Мори (7.36) для G^R и принимая во внимание что Ω и M при $k \rightarrow 0$ стремятся к нулю не медленнее чем k^2 , мы получим

$$D_\nu = \frac{i}{2} \lim_{\bar{\omega} \rightarrow 0 + i0} \lim_{k \rightarrow 0} \frac{\partial^2}{\partial k^2} [\Omega_\nu^R(k, k) + M_\nu^R(k, k; \bar{\omega})] \tilde{G}_\nu^R(k, k; 0). \quad (7.94)$$

Когда функция памяти при $k \rightarrow 0$ стремится к нулю быстрее чем k^2 , уравнение (7.94) может быть переписано в более простой форме,

$$D_\nu = \lim_{q \rightarrow 0} [k^{-2} \langle \mathcal{L}^+ \tilde{\delta \varphi}_\nu(k) | \tilde{\delta \varphi}_\nu(k) \rangle], \quad \nu = s, \mu. \quad (7.95)$$

Описанный подход очень полезен в сверхвязком случае, когда эволюция системы описывается оператором Смолуховского $\mathcal{L}_{\text{sm}}$. Заметим также, что $\tilde{G}_s^R(k, k; 0) = \langle e^{-ikx_l} e^{+ikx_l} \rangle = 1$, в то время как функция $\tilde{G}_\mu^R$ при $t = 0$ определяет стационарный структурный фактор

$$\tilde{\chi}(k) \equiv \tilde{G}_\mu^R(k, k; 0), \quad (7.96)$$

так что

$$\chi = \lim_{k \rightarrow 0} \tilde{\chi}(k) \quad (7.97)$$

вследствие равенства $\chi = \langle (\delta N)^2 \rangle / N = \int \int dx dx' G_\mu^R(x, x'; 0)$.

7.2 Диффузия кинка

Вначале мы обсудим динамику системы когда цепочка содержит только один кинк. При достаточно малой температуре эта ситуация описывается периодическими граничными условиями $u_{N+1} = u_1 \pm a_s$. Малость температуры, т.е. выполнение неравенства $k_B T \ll \varepsilon_k$, здесь необходима для того, чтобы можно было пренебречь вероятностью термически активированного рождения дополнительных пар кинков и антикинков. Таким образом, задача состоит в том чтобы получить и решить стохастическое уравнение движения для коллективной координаты кинка $X(t)$. Коэффициент диффузии кинка тогда может быть получен как

$$D_k = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{2t} \langle [X(t) - X(0)]^2 \rangle, \quad (7.98)$$

или, более обще, как

$$D_k(\bar{\omega}) = \int_0^\infty dt e^{i\bar{\omega}t} \langle \dot{X}(t) \dot{X}(0) \rangle, \quad \text{Im } \bar{\omega} > 0. \quad (7.99)$$

Физической причиной диффузионного движения кинка является эффективное взаимодействие ФК цепи с термостатом, то есть существование ненулевого “внешнего” коэффициента трения η_{ext} . Однако, динамика кинка на долго-временной шкале может быть также диффузионной даже для изолированной цепи. Действительно, как мы показали выше, любое отклонение модели от интегрируемого случая чисто СГ-ой системы, такое как несинусоидальный потенциал подложки, нелинейность межатомного взаимодействия и дискретность атомной цепи, будет разрушать точную интегрируемость системы. Следовательно, кроме внешнего хаоса создаваемого подложкой, динамика ФК цепочки должна показывать собственную “внутреннюю хаотизацию”. Этот эффект можно приближенно описать введением “внутреннего” коэффициента трения η_{int} . Ясно что η_{int} не возможно легко вычислить, но ее легко оценить при помощи теории возмущения.

Интересно, что динамика кинка показывает два типа диффузии, а именно, *нормальную (вязкую)* диффузию и *аномальную* диффузию. Для объяснения последнего механизма диффузионного движения кинка, мы должны вспомнить, что любое столкновение кинка с другими возбуждениями, такими как фононы или бризеры приводит к фазовому сдвигу кинка, то есть к смещению координаты кинка. Если такие столкновения происходят случайно по времени, кинк будет совершать броуновское случайное движение, сохраняя однако без изменения среднее значение скорости, так как данные столкновения происходят практически упруго (или даже точно упруго для СГ предела). Важно отметить, что этот диффузионный механизм присутствует даже в интегрируемой СГ модели, в которой отсутствует вязкая диффузия (если, конечно, мы предполагаем, что создающие этот механизм столкновения могут быть промоделированы как случайные процессы, например, вследствие взаимодействия с тепловой баней фононов). Физическим обоснованием для аномальной диффузии служит тот факт, что кинк является протяженным объектом со своей собственной шириной, тогда как обычная частица не может демонстрировать такой тип движения, являясь точечным объектом, положение которого после столкновения не совершает никакого сдвига. Коэффициент аномальной диффузии может быть вычислен в приближении случайной фазы, как это обычно принимается в случае трения для частицы линейно связанной с термостатом (см., например, монографию [610]).

В реальных физических системах коэффициент диффузии кинка определяется этими двумя упомянутыми выше механизмами и следует ожидать, что D_k определяется коэффициентом аномальной диффузии на коротко-временных шкалах, $t \ll \eta^{-1}$, и коэффициентом вязкой диффузии D_η для $t \gg \eta^{-1}$. Кроме того, в строго дискретной цепи, когда амплитуда ПН потенциала превышает энергию термализованного движения кинка, $E_{PN} > k_B T$, диффузия кинка становится термически возбужденной согласно закону Аррениуса $D_k \propto \exp(-E_{PN}/k_B T)$.

7.2.1 Уравнение Ланжевена

В присутствии вязкого трения (7.3) и аддитивной стохастической силы, уравнение движения для классической ФК цепочки изменяется к виду

$$m_a \ddot{x}_l + m_a \eta \dot{x}_l - g(x_{l+1} + x_{l-1} - 2x_l) + V'_{\text{sub}}(x_l) = \delta F_l(t), \quad (7.100)$$

где $\dot{x}_l \equiv dx_l/dt$. Флуктуационно-диссипативная теорема говорит, что самокорреляционная функция флуктуирующей силы δF_l должна удовлетворять соотношению

$$\langle \delta F_l(t) \delta F_{l'}(t') \rangle = 2\eta m_a k_B T \delta(t - t'), \quad (7.101)$$

в то время как кросс-корреляционная функция, $\langle \delta F_l \delta F_{l'} \rangle$ for $l \neq l'$, может быть определена произвольным образом. В частности, естественно предположить что пространственные корреляции экспоненциально убывают с ростом корреляционной длины λ_F ,

$$\langle \delta F_l(t) \delta F_{l'}(t') \rangle = 2\eta m_a k_B T \exp(-|l - l'| a_s / \lambda_F) \delta(t - t'). \quad (7.102)$$

Ниже мы рассмотрим СГ предел, то есть $g \gg 1$ и $V'_{\text{int}}(x) = \sin x$, когда мы должны взять $x_l = l a_s + u_l$, $l a_s \rightarrow x$, $u_l(t) \rightarrow u(x, t)$, $\delta F_l(t) \rightarrow \delta F(x, t)$, так что уравнение Ланжевена (7.100) принимает (напомним что $m_a = 1$) вид

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - d^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \eta \frac{\partial u}{\partial t} + \sin u = \delta F(x, t). \quad (7.103)$$

Чтобы написать уравнение (7.102) в континуальном пределе, мы должны использовать дополнительные преобразования $\sum_l \rightarrow \int dx/a_s$ и $\delta_{ll'} \rightarrow a_s \delta(x - x')$, получая таким образом

$$\langle \delta F(x, t) \delta F(x', t') \rangle = 2\eta k_B T \frac{\exp(-|x - x'|/\lambda_F)}{2\lambda_F [1 - \exp(-a_s/2\lambda_F)]} \delta(t - t'). \quad (7.104)$$

Для пространственно некоррелированной случайной силы, $\lambda_F \rightarrow 0$, уравнение (7.104) сводится к

$$\langle \delta F(x, t) \delta F(x', t') \rangle = 2\eta k_B T a_s \delta(x - x') \delta(t - t'), \quad (7.105)$$

в то время как для когерентного внешнего шума, $\lambda_F \rightarrow \infty$, это приводит к соотношению

$$\langle \delta F(x, t) \delta F(x', t') \rangle = 2\eta k_B T \delta(t - t'). \quad (7.106)$$

В безразмерных единицах, когда $\tilde{x} = x/d$ и $\tilde{t} = \omega_0 t$, уравнение Ланжевена (7.103) принимает форму (в дальнейшем мы опускаем все тильды),

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \sin u = f(x, t; u, u_t) \equiv \delta F(x, t) - \eta \frac{\partial u}{\partial t}. \quad (7.107)$$

Если возмущение f мало, решение уравнения (7.107) может быть получено при помощи теории возмущения [27, 86]. А именно, ища решение в форме нерелятивистского кинка,

$$u(x, t) = 4 \tan^{-1} \exp \{ -\sigma [x - X(t)] \}, \quad (7.108)$$

мы получим следующее уравнение для координаты кинка $X(t)$,

$$\frac{d^2 X}{dt^2} = -\frac{\sigma}{4} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{f(x, t; u, u_t)}{\cosh[x - X(t)]}. \quad (7.109)$$

Таким образом, эффект возмущений сводится к модуляции координаты и скорости кинка, в то время как форма кинка остается без изменений (адиабатическое приближение). Уравнения (7.107) и (7.109) приводят к уравнению Ланжевена для $X(t)$ (см., например, работы [244, 611, 612])

$$m \frac{d^2 X}{dt^2} + m\eta \frac{dX}{dt} = \delta F_k(t) \quad (7.110)$$

с кинковой флуктуирующей силой удовлетворяющей соотношению

$$\langle \delta F_k(t) \delta F_k(t') \rangle = 2\eta m^* k_B T \delta(t - t'). \quad (7.111)$$

Здесь m – масса кинка, а эффективная масса m^* определяется как

$$\begin{aligned} m^* &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dx' u(x) u(x') \langle \delta F(x) \delta F(x') \rangle \\ &= \frac{ma_s}{2\lambda_F [1 - \exp(-a_s/2\lambda_F)]} \xi \left(2, \frac{1 + \lambda_F/a_s}{2\lambda_F/a_s} \right), \end{aligned} \quad (7.112)$$

где $\xi(s, v) = \sum_{n=0}^{\infty} (n + v)^{-s}$ – обобщенная римановская дзета-Функция. Для долговременной шкалы, $t \gg \eta^{-1}$, уравнение Ланжевена описывает броуновское движение кинка,

$$\langle X^2(t) \rangle = 2D_\eta t, \quad D_\eta = \left(\frac{m^*}{m} \right) \frac{k_B T}{m\eta}, \quad (7.113)$$

где D_η – коэффициент диффузии.

Таким образом, если флуктуирующая сила пространственно некоррелирована, то есть $\lambda_F \ll d$, из уравнения (7.112) мы будем иметь $m = m^*$ и среднюю кинетическую энергию нерелятивистского кинка $\frac{1}{2} m \langle \dot{X}^2(t) \rangle$ равную тепловой энергии $\frac{1}{2} k_B T$ в равновесном состоянии. В этом случае коэффициент диффузии кинка равен [146, 612, 613]

$$D_\eta = \frac{k_B T}{m\eta}. \quad (7.114)$$

В противоположном случае пространственно коррелированной флуктуационной силы, то есть для $\lambda_F \gg d$, мы получим $m^* = (\pi^2/2)m$, и термальная энергия единственного кинка изменится к виду

$$\frac{1}{2}m\langle\dot{X}^2(t)\rangle = \frac{\pi^2}{4}k_BT. \quad (7.115)$$

Смысл этой ренормализации состоит в том, что кинк является протяженным объектом и, следовательно, его взаимодействие с внешним источником шума изменяется для того чтобы удовлетворять определенному отношению ширины кинка d и корреляционной длины шума λ_F . В случае когерентного внешнего шума диффузия кинка определяется выражением [146, 241, 612, 614]

$$D_\eta = \frac{\pi^2}{16} \frac{k_BT}{m\eta}. \quad (7.116)$$

Результат (7.116) был проверен с помощью молекулярно динамического моделирования [241]–[243], которое показало что предположение о сохранении формы кинка работает с хорошей точностью.

Диффузия кинка в случае некоррелированного шума была в деталях изучена Квинтеро с соавторами [615] в континуальном приближении, когда уравнения движения сводятся СГ форме (7.103) с коррелятором (7.105). Решение искалось в форме

$$u(x, t) = u_{SG}[x - X(t)] + \int_{-\infty}^{+\infty} dk A_k(t) \Psi_k[x - X(t)], \quad (7.117)$$

где $u_{SG}(x)$ – профиль (нерелятивистского) СГ кинка, $X(t)$ – его положение, и $\{\Psi_k(x)\}$ – полный ортонормальный набор собственных функций для линейного уравнения Шредингера (3.51) параграфа 3.3.2. Напомним, что $\Psi_0(x)$ соответствует имеющей нулевую частоту голдстоуновской моде, в то время как остальные фононные моды описывают возбужденный кинк. Подставляя анзац (7.117) в уравнение (7.103) получаем систему стохастических дифференциальных уравнений второго порядка для новых переменных $X(t)$ и $A_k(t)$. Тогда, определяя параметр ϵ как $\epsilon = (2\eta k_BT)^{1/2}$ и предполагая этот параметр ϵ малым для низких температур, функции $X(t)$ и $A_k(t)$ раскладываются по степеням ϵ , то есть $X(t) = \sum_{n=1}^{\infty} \epsilon^n X_n(t)$ and $A_k(t) = \sum_{n=1}^{\infty} \epsilon^n A_k^n(t)$. Подставляя эти выражения в упомянутую выше систему уравнений и группируя вместе члены одного порядка по ϵ , получим иерархию уравнений, наименьшие степени которой могут быть затем решены. После достаточно длинных, но прямых вычислений авторы нашли коррекцию второго порядка по T для коэффициента диффузии кинка (7.114),

$$D_\eta = \frac{k_BT}{m\eta} \left(1 + C \frac{k_BT}{\epsilon_k} \right), \quad (7.118)$$

где $\epsilon_k = 8\sqrt{g}$ – энергия покоя кинка, а множитель $C \approx 1.733$ (для сверхвязкого случая, $\eta \rightarrow \infty$, Квинтеро с соавторами [616] нашли при помощи того же подхода несколько меньшее значение для безразмерной постоянной $C \approx 1.244$). Зависимость (7.118) достаточно хорошо согласуется с результатами численного моделирования для температур $k_BT < 0.1 \epsilon_k$.

Результат (7.118) несколько неожидан. Действительно, трение и стохастическая сила в уравнении (7.103) разрушают точную интегрируемость уравнения СГ, что обычно отражается в кинк-фононном взаимодействии. Такое взаимодействие обычно приводит к “окружению” кинка фононным облаком (поляронный эффект), так что эффективная масса и вязкость кинка должны возрасти, $m \rightarrow m_{\text{eff}} > m$ и $\eta \rightarrow \eta_{\text{eff}} > \eta$. Действительно, Квинтеро и др. [615] получили, что средняя кинетическая энергия кинка больше энергии соответствующей принципу равного распределения:

$$\frac{1}{2}m\langle\dot{X}^2(t)\rangle = \frac{1}{2}k_BT \left(1 + C' \frac{k_BT}{\epsilon_k} \right) \quad (7.119)$$

(здесь $C' \approx 2.744$), что объясняется возрастанием эффективной массы кинка. Следует ожидать, что коэффициент диффузии кинка $\sim k_BT/m_{\text{eff}}\eta_{\text{eff}}$ будет уменьшаться по сравнению с значением соответствующим уравнению (7.114). Причина этого эффекта состоит в том, что кинк не является точко-подобным объектом, а является протяженным объектом.

В дискретной ФК системе мы должны учесть колебания формы кинка когда он движется в ПН рельефе. Эти колебания приводят к излучению фононов, так что кинк-фононное взаимодействие приводит к внутреннему торможению движения кинка. Приблизительно этот эффект можно учесть используя у уравнениях (7.114) или (7.116) зависящий от температуры коэффициент трения,

$$\eta(T) \approx \eta(0) + \alpha T, \quad (7.120)$$

где α – некоторый безразмерный коэффициент [617].

В некоторых физических задачах флуктуирующая сила действующая на ФК цепь со стороны подложки моделируется мультипликативным внешним шумом. В этом случае соответствующее уравнение Ланжевена принимает форму

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - d^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \eta \frac{\partial u}{\partial t} + \sin u = \delta V(x, t) \sin u, \quad (7.121)$$

где обычно предполагается что $\delta V(x, t)$ является гауссовской случайной величиной с нулевым средним и корреляционной функцией

$$\langle \delta V(x, t) \delta V(x', t') \rangle = \mu \delta(t - t') \delta(x - x'), \quad (7.122)$$

μ – мера интенсивности шума, $\mu \propto T$. Теория возмущений примененная к этому типу задач показывает, что мультипликативный шум приводит к движению кинка подобному броуновскому с коэффициентом диффузии, отличным от вычисленного для аддитивного шума [241, 618].

7.2.2 Внутренняя вязкость

В предыдущем параграфе мы предположили что источником вязкого трения η является энергетический обмен между атомами цепи и подложкой, то есть присутствует только внешнее трение η_{ext} . Однако ясно, что броуновская диффузия кинка должна присутствовать также и в изолированной ФК цепи, причиной этого является неинтегрируемость первичной модели. Если соответствующая функция реакции (7.1), (7.2) аппроксимируется локальной функцией, а флуктуирующая сила – аддитивным некоррелированным шумом, то можно вычислить коэффициент кинка

$$D_\eta = \frac{k_B T}{m \eta_{\text{int}}}, \quad (7.123)$$

так что задача сводится к вычислению внутреннего коэффициента трения η_{int} .

Хотя не возможно точно вычислить значение η_{int} , но его можно оценить рассматривая изменение импульса кинка при его столкновении с другими возбуждениями, такими как фононы и/или бризеры. Эти вычисления обычно основаны на технике теории возмущения, таких как метод Мори и метод функции памяти, обратное преобразование рассеяния, метод в которой координата кинка $X(t)$ рассматривается как каноническая переменная, и т. д. [619]–[625].

В качестве примера, давайте ниже кратко рассмотрим подход использованный Барьяхтаром с соавторами в работе [625], где был исследован континуальный предел модели ФК с несинусоидальным потенциалом подложки. Как обычно, полевая переменная $u(x, t)$ представляется в форме

$$u(x, t) = u_k(x - vt) + \phi(x, t), \quad (7.124)$$

где u_k соответствует медленно движущемуся невозмущенному кинку, а $\phi(x, t)$ описывает фононное поле сопровождающее движение кинка. Подставляя уравнение (7.124) в систему Гамильтона и раскладывая $V_{\text{sub}}(u_k + \phi)$ в ряды Тейлора по ϕ , Гамильтониан может быть представлен в форме $H = H_k + H_{\text{ph}} + H_{\text{int}}$, где часть H_k соответствует изолированному кинку, H_{ph} описывают фононную подсистему, а третий член

$$H_{\text{int}} = \sum_{n=3}^{\infty} H_n; \quad H_n \propto \frac{1}{n!} \int dx \left(\frac{\delta^n V_{\text{sub}}(u)}{\delta u^n} \right) \Big|_{u=u_k} \phi^n, \quad (7.125)$$

отвечает за неупругое рассеяние фононов на движущимся кинке. Затем, давайте введем полный набор функций $\Psi_\alpha(x)$ найденных как собственные функции псевдо-Шредингеровского уравнения (3.52); мы обозначим соответствующие собственные значения как ω_α . Набор $\{\Psi_\alpha(x)\}$ состоит из голдстоуновской моды, профильных мод (если они есть) и мод непрерывного спектра. Используя этот базис, мы введем новые канонические переменные ξ_α через разложение

$$\phi(x, t) = \sum_{\alpha} \xi_{\alpha} \Psi_{\alpha}(x) e^{i\omega_{\alpha} t}, \quad (7.126)$$

и перепишем H_{int} в новых переменных ξ_α . Тогда можно вычислить вероятность n -фононного неупругого процесса рассеяния и получить соответствующий вклад в скорость энергетического обмена η_{int} . Для чисто СГ модели такая процедура дает тривиальный результат $\eta_{\text{int}} = 0$, так как вклады от всех порядков компенсируют друг друга, как и должно быть для точно интегрируемой модели, где движение кинка не сопровождается излучением [619, 625]. С другой стороны, для неинтегрируемого случая, вклад наименьшего порядка в неупругое рассеяние дает трех-фононное рассеяние и оно приводит к коэффициенту вязкого трения

$$\eta_{\text{int}} \approx C_1 \omega_0 \left(\frac{k_B T}{\varepsilon_k} \right)^2. \quad (7.127)$$

Подставляя уравнение (7.127) в уравнение (7.123), мы получим коэффициент диффузии для медленно движущегося в изолированной ФК цепочке кинка

$$D_\eta = C d^2 \omega_0 \left(\frac{\varepsilon_k}{k_B T} \right). \quad (7.128)$$

Безразмерные множители C_1 и C в уравнениях (7.127) и (7.128) зависят от рассматриваемой конкретной модели, например, в случае модели ϕ^4 коэффициент $C \approx 20$ [620].

Уравнения (7.127) и (7.128) описывают классическое поведение цепи. При экстремально низких температурах, то есть при $k_B T \ll \hbar \omega_0$, мы должны для фононов использовать квантовую статистику, которая приводит к результату [625] $\eta_{\text{int}} \propto \exp(-C_2 \hbar \omega_0 / k_B T)$, а $D_k \propto T^2 \exp(C_2 \hbar \omega_0 / k_B T)$, где C_2 – другая безразмерная константа. Квантовые эффекты диффузии кинка были также рассмотрены Аламуди с соавторами [626].

7.2.3 Аномальная диффузия

Когда кинк сталкивается с другими возбуждениями, происходит его фазовый сдвиг, или пространственное смещение $\delta(k)$ без изменения его импульса. В результате этого, координата кинка, которая имеет начальное значение X_0 , изменяется согласно уравнению

$$X(t) = X_0 + V_0 t + \delta X(t), \quad \delta X(t) = \int dk \delta(k) \nu_t(k), \quad (7.129)$$

где V_0 – начальная скорость кинка, а $\nu_t(k) dk$ – обозначение для числа кинковых столкновений с возбуждениями имеющими волновые числа между k и $k + dk$. Функция $\nu_t(k)$ определяется как $\nu_t(k) = \rho(k) n_t(k)$, где $\rho(k)$ – плотность фононных состояний с волновым числом k , а $n_t(k)$ – число столкновений с модой имеющей волновое число k . Заметим, что такой подход основан на фононной картине низкоэнергетических возбуждений [620], [627]–[631]. Использование альтернативного описания в терминах бризеров [624, 632, 633] приводит к тем же самым результатам. Здесь мы следуем работе Теодоракополос и Веллер [624].

Давайте предположим, что низкоэнергетические возбуждения создают тепловую баню, то есть, что кинк-фононные столкновения происходят случайно и, более того, что за интервал времени между столкновениями тепловая баня “регенерирует” свое равновесное состояние. В этом состоянии, из за множества пространственных сдвигов кинка $\{\delta(k)\}$, его динамика будет достаточно диффузионной для того, чтобы рассмотреть ее как случайное блуждание со средней скоростью V_0 ,

$$\langle (X(t) - X_0 - V_0 t)^2 \rangle = 2 D_a t. \quad (7.130)$$

Так как сдвиг $\delta(k)$ пропорционален квадрату амплитуды рассеиваемого фонона (или бризера), то постоянная аномальной диффузии D_a должна быть пропорциональна T^2 . Действительно, флуктуации положения кинка относительно теплового среднего значения $X(t)$ равны

$$\delta X(t) = \int dk \delta(k) \delta \nu_t(k), \quad (7.131)$$

и поэтому

$$\langle [\delta X(t)]^2 \rangle = \int dk dk' \delta(k) \delta(k') \langle \delta \nu_t(k) \delta \nu_t(k') \rangle. \quad (7.132)$$

Беря фононы как тепловую баню, мы получим

$$\langle \delta \nu_t(k) \delta \nu_t(k') \rangle = L^{-1} |v(k)| t \rho_0 \delta(k - k') \langle [\delta n(k)]^2 \rangle, \quad (7.133)$$

где $v(k)$ – групповая скорость фононов с волновым вектором k , $v(k) = d\omega_{\text{ph}}(k)/dk$, $\omega_{\text{ph}}(k) = \sqrt{\omega_0^2 + c^2 k^2}$, и $\rho_0(k) = \rho_0 \equiv L/2\pi$, L – длина цепи. Используя классический предел статистики Бозе-Эйнштейна,

$$\langle [\delta n(k)]^2 \rangle = [k_B T / \hbar \omega_{\text{ph}}(k)]^2,$$

мы из уравнений (7.132) и (7.133) получаем равенства

$$\langle [\delta X(t)]^2 \rangle = 2 D_a t, \quad D_a = \tilde{C} d^2 \omega_0 \left(\frac{k_B T}{\varepsilon_k} \right)^2. \quad (7.134)$$

Здесь безразмерный множитель $\tilde{C}$ зависит от рассматриваемой модели, например $\tilde{C} = 2/3\pi$ для СГ системы и $\tilde{C} = 0.916$ для модели ϕ^4 [620, 634].

Аномальную (недиссипативную) диффузию кинка впервые исследовали Вада и Шриффер [627] для модели ϕ^4 . Нужно подчеркнуть, что этот механизм диффузии предполагает существование “внешней” термализации, которая создает низкоэнергетическую тепловую баню. Единственный механизм такой термализации, это энергетический

обмен между различными степенями свободы системы, которая появляется из-за неинтегрируемости изолированной ФК цепочки и/или из-за связи цепи с подложкой. В результате аномальная диффузия определенная уравнением (7.130) существует только для коротко-временных шкал, $t \ll \eta^{-1}$, где $\eta = \eta_{\text{ext}} + \eta_{\text{int}}$, в то время как для $t \gg \eta^{-1}$ динамика кинка должна быть вязкой и приводить к стандартному выражению $\langle [X(t) - X_0]^2 \rangle = 2D_\eta t$ с $D_\eta = k_B T / m\eta$ [622], [635]–[637].

Как было проверено Теодоракополусом и Веллером [624], доминирующий вклад в D_a приходит от относительно узкой зоны фононных волновых векторов, $k \sim 0.05 \pi / a_s$. Следовательно, континуальное приближение дает корректное значение D_a также и для дискретной ФК модели. Кроме того, малое число фононов около краев зоны Бриллюэна дают увеличение неэластичности кинк-фононного рассеяния [629], приводящее к малому вкладу в коэффициент η . Теодоракополус и Веллер [624] наблюдали аномальную диффузию при проведении молекулярно-динамического моделирования модели СГ. Заметим однако, что процедура дискретизации примененная к континуальному уравнению всегда разрушает интегрируемость модели и может быть причиной для последующей вязкой диффузии кинков.

7.2.4 Коэффициент диффузии кинков

В общем случае, коэффициент диффузии кинка $D_k(\omega)$ определяется уравнением (7.99). Используя метод Кубо-Мори [580, 584], коэффициент $D_k(\omega)$ может быть выражен в следующей форме [637]

$$D_k(\omega) = \frac{k_B T}{m[\eta(\omega) - i\omega]}, \quad (7.135)$$

где $\eta(\omega)$ является коэффициентом полного обобщенного трения. Раскладывая $\eta(\omega)$ по ω ,

$$\eta(\omega) = \eta_0 - i\eta_1 \left(\frac{\omega}{\omega_0} \right) + \eta_2 \left(\frac{\omega}{\omega_0} \right)^2 + \dots, \quad (7.136)$$

действительная часть коэффициента диффузии может быть представлена как

$$\text{Re } D_k(\omega) \approx \frac{k_B T}{m} \frac{\eta_0 + \eta_2(\omega/\omega_0)^2}{\eta_0^2 + (\omega/\omega_0)^2[(\omega_0 + \eta_1)^2 + 2\eta_0\eta_2]}. \quad (7.137)$$

Таким образом, вязкая диффузия характеризуется коэффициентом

$$D_k \approx \frac{k_B T}{m\eta_0}, \quad \eta_0 = \lim_{\omega \rightarrow 0} \eta(\omega). \quad (7.138)$$

Она доминирует для низких частот, $\omega \ll \omega^*$, или на долго-временной шкале, $t \gg t^* = 2\pi/\omega^*$, где $\omega^* = \omega_0 \sqrt{\eta_0/\eta_2}$. Для СГ модели мы имеем $\eta_0 = 0$ и $\omega^* = 0$, так что естественно вязкая диффузия отсутствует. С другой стороны, для высоких частот, когда $\omega \gg \omega^*$ (или на коротко-временной шкале) доминирует аномальная диффузия. Сравнивая $D_k(\omega)$ для $\omega \gg \omega^*$ с значением D_a данным уравнением (7.134), мы можем оценить коэффициент η_2 как $\eta_2 \sim \omega_0(k_B T/\varepsilon_k)$ и затем найти частоту кроссовера ω^*

$$\omega^* \approx \left(\frac{\omega_0 \eta_0 \varepsilon_k}{k_B T} \right)^{1/2}. \quad (7.139)$$

Для изолированной ФК цепочки, когда, согласно уравнению (7.127), $\eta_0 \sim \omega_0(k_B T/\varepsilon_k)^2$, мы получаем $\omega^* \sim \omega_0(k_B T/\varepsilon_k)^{1/2}$. Таким образом, если $\omega \neq 0$ и температура T возрастает, должен иметь место кроссовер из аномальной диффузии $D_k \approx D_a$ к стандартной (вязкой) диффузии $D_k \approx D_\eta$. Этот эффект был исследован Огата и Вада [620] для модели ϕ^4 (см. Рис.7.1). Однако, если ФК цепь связана с термостатом и $\eta_0 \neq 0$ при $T \rightarrow 0$, то должно наблюдаться обратное явление.

До сих пор мы пренебрегали существованием в ФК цепочке ПН рельефа. В строго дискретной ФК цепи, когда $g \leq 1$, амплитуда ПН потенциала может превышать энергию термализации кинка и диффузия кинка становится активируемой. В этом случае, феноменологически, уравнение Ланжевена (7.110) для координаты кинка $X(t)$ должно быть заменено на уравнение [174, 613, 638, 639]

$$m\ddot{X} + m\eta\dot{X} + V'_{PN}(X) = \delta F_k(t), \quad (7.140)$$

где $V_{PN}(X) \approx \frac{1}{2}\varepsilon_{PN}(1 - \cos X)$, $\delta F_k(t)$ – гауссовская сила, $\langle \delta F_k(t) \rangle = 0$ и $\langle \delta F_k(t) \delta F_k(t') \rangle = 2\eta m k_B T \delta(t - t')$, а m – масса кинка определенная по формуле (3.10). Коэффициент затухания η в уравнении (7.140) совпадает с коэффициентом внешнего трения для изолированного атома, если пренебречь внутренним трением

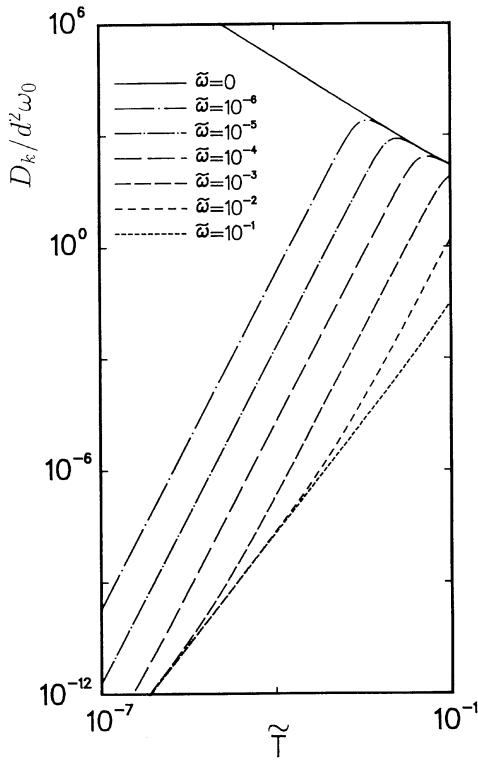


Рис. 7.1. График действительной части коэффициента $D_k(\omega)/d^2\omega_0$ для модели ϕ^4 , как функция от безразмерной температуры $\tilde{T} = \frac{2}{3}k_B T/\varepsilon_k$ для нескольких значений безразмерной частоты $\tilde{\omega} = \omega/\omega_0$ (на осях использованы логарифмические шкалы). В области $\tilde{T} < \tilde{\omega}^2$ коэффициент диффузии приближается к $D_a \propto T^2$, в то время в области $\tilde{T} > \tilde{\omega}^2$, $D_k(\omega)$ приближается к кривой $D_\eta \propto T^{-1}$ [620].

кинка. Действительно, это легко проверить применяя оператор $m \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \dots$ к обоим сторонам уравнения движения (7.11) и учитывая определение координаты кинка X . Применимость уравнения Ланжевена (7.140) была тщательно проверена Катута с соавторами [640] в рамках сверхвязкой модели ϕ^4 . Было показано, что при очень высокой дискретности, когда $g \ll 1$, нужно также учесть слабую зависимость массы кинка и его коэффициента затухания от координаты кинка X , так как обе эти величины $m(X)$ и $\eta(X)$ в действительности являются периодическими функциями с минимумами по X соответствующими точкам минимума ПН потенциала.

Уравнение (7.140) приводит к закону Аррениуса для коэффициента диффузии при $t \rightarrow \infty$ (или $\omega \rightarrow 0$),

$$D_k = D_0 \exp(-\varepsilon_{PN}/k_B T), \quad (7.141)$$

где предэкспонентный множитель D_0 может быть приближенно вычислен с помощью теории Крамера,

$$D_0 \approx \begin{cases} a_s^2 \omega_{PN}/2\pi & \text{если } \eta^* \ll \eta < \omega_{PN}^*, \\ a_s^2 \omega_{PN} \omega_{PN}^*/2\pi\eta & \text{если } \eta > \omega_{PN}^*, \end{cases} \quad (7.142)$$

где

$$\omega_{PN} = \left(\frac{V_{PN}''(0)}{m} \right)^{1/2}, \quad \omega_{PN}^* = \left(-\frac{V_{PN}''(a_s/2)}{m} \right)^{1/2},$$

и

$$\eta^* = \frac{\omega_{PN} k_B T}{2\pi \varepsilon_{PN}}.$$

Случай слабого трения, $\eta < \eta^*$, является более сложным для аналитического исследования. Численно, активированную диффузию кинка (7.141) наблюдали Комбс и Ир [641] при молекулярно-динамическом моделировании модели ϕ^4 , а для недемпфированной стандартной ФК модели – Холовой и Гиллан [642], Гиллан и Холовой [552].

В приложениях рассмотренной выше теории к реалистическим физическим объектам нужно принять во внимание следующие замечания:

(i) Коэффициент полного “обобщенного” трения $\eta(\omega)$ состоит из внутреннего вклада η_{int} и внешнего (вклада от подложки) η_{ext} . Оба вклада η_{int} и η_{ext} в общем случае зависят от частоты ω и температуры T . В некоторых случаях, например для цепи атомов химически адсорбированных на поверхности кристалла, внутренним трением можно пренебречь, $\eta_{\text{int}} \ll \eta_{\text{ext}}$ [184];

(ii) Внутреннее трение η_{int} имеет своим источником эффекты приводящие к излучению фононов. Эти эффекты обусловлены неинтегрируемостью ФК цепочки, они отсутствуют в полностью интегрируемом уравнении СГ. Неинтегрируемость вызывают все факторы, такие как эффекты дискретности, несинусоидальная форма потенциала подложки, ангармонизм межатомного взаимодействия, возможное присутствие примесей и т.д.

7.3 Динамическая корреляционная функция

Динамические корреляционные функции описывают экспериментально измеряемый спектр. А именно, для системы находящейся в равновесном состоянии, дифференциальное сечение неупругого рассеяния частицы (например, фонона, электрона, нейтрона, иона, и т.д.) с изменением ее энергии ($\varepsilon_{\text{fin}} = \varepsilon_{\text{ini}} - \hbar\omega$) и импульса ($k_{\text{fin}} = k_{\text{ini}} - k$) выражаются через динамическую корреляционную функцию,

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\varepsilon} \propto \left(\frac{k_{\text{fin}}}{k_{\text{ini}}}\right) \widehat{\widehat{Q}}_{\text{AA}}(k; \omega). \quad (7.143)$$

Здесь Ω – телесный угол, а $\widehat{\widehat{Q}}_{\text{AA}}(k; \omega)$ – Фурье преобразование структурного фактора $Q_{\text{AA}}(x, t)$,

$$\widehat{\widehat{Q}}_{\text{AA}}(k; \omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} \widetilde{Q}_{\text{AA}}(k; t), \quad (7.144)$$

$$\widetilde{Q}_{\text{AA}}(k; t) = \langle \delta\widetilde{A}(-k; t) \delta\widetilde{A}(k; 0) \rangle, \quad (7.145)$$

$$\delta\widetilde{A}(k; t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_l \exp(-ikla_s) [A_l(t) - \langle A_l(t) \rangle]. \quad (7.146)$$

В континуальном пределе мы должны положить

$$A(x; t) = a_s \sum_l \delta(x - la_s) A_l(t) \quad (7.147)$$

и

$$\delta\widetilde{A}(k; t) = \frac{1}{\sqrt{La_s}} \int dx e^{-ikx} [A(x; t) - \langle A(x; t) \rangle]. \quad (7.148)$$

Динамическая корреляционная функция связана со статической, изученной выше в параграфе 6.5.5, соотношением

$$\widetilde{Q}(k) = \widetilde{Q}(k; t = 0) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \widehat{\widehat{Q}}(k; \omega). \quad (7.149)$$

Переменная A в корреляционной функции связана с основными переменными входящими гамильтониан системы. Например, световое рассеяние возникает от флуктуаций плотности атомов, так что мы должны положить

$$A(x; t) = \rho(x; t) \equiv \sum_l \delta(x - x_l(t)). \quad (7.150)$$

Когда модель ФК описывает ферромагнитную цепочку спинов, тогда

$$A_l = s_l \equiv \sin u_l \quad \text{или} \quad A_l = c_l \equiv \cos u_l, \quad (7.151)$$

в то время как для антиферромагнитной цепочки, подходящими переменными являются [630, 632, 633]

$$A_l = s_{\frac{1}{2}, l} \equiv \sin\left(\frac{u_l}{2}\right) \quad \text{or} \quad A_l = c_{\frac{1}{2}, l} \equiv \cos\left(\frac{u_l}{2}\right). \quad (7.152)$$

Естественно ожидать, что все элементарные возбуждения ФК цепочки, такие как фононы, бризеры и кинки будут принимать участие в процессах рассеяния дающих разные пики (резонансы) для различных k и ω . К сожалению, не существует надежно обоснованной аналитической методики для вычисления динамических корреляционных функций системы взаимодействующих частиц развивающихся согласно уравнениям Ньютона или Ланжевена, поэтому компьютерное моделирование остается самым действенным методом их вычисления. Однако, при низко- или высоко-температурном пределах, динамические корреляционные функции допускают приближенное аналитическое изучение.

Более простым является высоко-температурный случай $k_B T \gg \varepsilon_k$, когда наличие потенциала подложки не существенно, кинки не играют никакой роли, а ФК цепочка ведет себя как газ слабо взаимодействующих фононов, связанных с почти гармоническими высоко амплитудными колебаниями цепочки с акустическим законом дисперсии $\omega_T^2(k) = 2g[1 - \cos(ka_A)]$. В этом случае функции корреляции, как ожидают, будут иметь пики соответствующие резонансам близким к $\omega = \pm\omega_T(k)$. Это предсказание было подтверждено молекулярно-динамическим моделированием [643].

В низко-температурном пределе $k_B T \ll \varepsilon_k$ мы должны ожидать слабо-затухающие резонансы при $\omega = \pm\omega_A(k)$, где $\omega_A(k)$ соответствует оптически-фононной ветви с самосогласованной частотой ($\theta \simeq 1$)

$$\omega_A^2(k) = \omega_0^2 \langle \cos u_l \rangle + 2g [1 - \cos(ka_s)].$$

Таким образом, высокочастотные пики в динамических корреляционных функциях, как ожидают, происходят в основном из-за одно-фононного отклика, с возможным ангармоничным расширением и вкладами от многофононных процессов более высоких порядков [643, 644].

Если A является четной функцией от u , такой как $A = u^2$ или $A = c \equiv \cos u$, то одно-фононный пик отсутствует, а первый неисчезающий вклад в Q_{AA} дают двухфононные процессы. Для примера, ангармоничная теория возмущения позволяет получить следующее выражение для функции Q_{cc} [643]:

$$\widehat{\tilde{Q}}_{cc}(k; \omega) \propto \left(\frac{k_B T}{\varepsilon_k} \right)^2 \sum_{k'} \frac{\delta(\omega \pm \Delta\omega_+) + \delta(\omega \pm \Delta\omega_-)}{\omega_A^2(k') \omega_A^2(k - k')}, \quad (7.153)$$

где $\Delta\omega_{\pm} = [\omega_A(k') \pm \omega_A(k - k')]$. Первый член в правой части уравнения (7.153) дает высоко-частотный резонанс при $\omega \approx 2\omega_A(k)$, в то время как второй член предсказывает низко-частотный пик при $\omega \approx 0$. Таким образом, в этом случае двух-фононные разностные процессы дают вклад в "центральный пик". Этот вклад, однако, может быть существенным только при больших k , $kd \geq 1$ [643, 644], так как при малых k доминирующий вклад в центральный пик дают кинки (см. далее).

Другие нетопологические возбуждения, бризеры, также могут давать вклады в динамические корреляционные функции. Внутренние бризерные колебания с частотой ω_{br} ($0 < \omega_{br} < \omega_0$) могут приводить к высоко-частотному пику, в то время как голдстоуновская мода бризера может давать вклад в центральный пик. Однако, бризерные вклады четко не отделяются от вкладов фононов и кинков (см. обсуждение в работах [518, 643, 644]).

Теперь мы обсудим вклады кинков в динамические корреляционные функции. Ясно, что они существенны только для низких температур. В качестве примера мы рассмотрим эксперименты по световому рассеянию, где мы имеем дело со структурным фактором плотности $Q_{\rho\rho}$. В континуальном приближении флуктуации плотности атомов описываются функцией

$$\rho(x; t) \simeq -\frac{1}{a_s} \frac{\partial u}{\partial x}. \quad (7.154)$$

Для изучения вклада кинков в $Q_{\rho\rho}$, давайте пренебрежем фононными флуктуациями и более того проигнорируем внутреннюю структуру кинка, положив для простоты

$$u(x; t) \simeq \sum_j a_s \sigma_j \Theta(x - X_j(t)), \quad (7.155)$$

где $\Theta(x)$ – (ступенчатая) функция Хевисайда, а суммирование происходит по всем кинкам. Приближение (7.155) допустимо на специальной шкале $x \geq d$, то есть для малых волновых векторов рассеяния, $k \leq d^{-1}$. Функция $\rho(x; t)$ теперь задается уравнением

$$\rho(x; t) \simeq \sum_j \sigma_j \delta(x - X_j(t)). \quad (7.156)$$

Подставляя уравнение (7.156) в уравнения (7.145) и (7.148), мы получаем

$$\begin{aligned} \tilde{Q}_{\rho\rho}(k; t) &\simeq L^{-1} \sum_j \langle \exp(ik[X_j(t) - X_j(0)]) \rangle \\ &= L^{-1} \sum_j \exp\left(-\frac{1}{2}k^2 \langle [X_j(t) - X_j(0)]^2 \rangle\right), \end{aligned} \quad (7.157)$$

где мы пренебрегли кинк-кинковыми корреляциями согласно основному допущению феноменологического подхода газа кинков.

Для свободного (баллистического) движения кинков мы имеем

$$\langle [X_j(t) - X_j(0)]^2 \rangle = \langle [\dot{X}_j(0) t]^2 \rangle = \frac{k_B T}{m} t^2. \quad (7.158)$$

Фурье преобразование уравнения (7.157) с уравнением (7.158) приводят к динамической корреляционной функцией

$$\widehat{\tilde{Q}}_{\rho\rho}(k; \omega) \propto \exp\left(-\frac{m\omega^2}{2k_B T k^2}\right). \quad (7.159)$$

Более аккуратные вычисления (см. работы [73, 643], [645]–[654]), которые учитывают эффекты обусловленные формой кинка, приводят к следующему выражению

$$\widehat{Q}_{AA}(k; \omega) = (2\pi k)^{-1} n_{\text{tot}} \bar{\gamma}^{-2} P(\bar{v}) |B(k/\bar{\gamma})|^2, \quad (7.160)$$

где n_{tot} – полная концентрация кинков, $\bar{v} = \omega/k$,

$$\bar{\gamma} = \gamma(\bar{v}) \equiv (1 - \bar{v}^2/c^2)^{-1/2}, \quad (7.161)$$

функция

$$P(v) = \gamma^3 \exp(-\gamma \varepsilon_k / k_B T) \left[\int_{-c}^{+c} dv \gamma^3 \exp(-\gamma \varepsilon_k / k_B T) \right]^{-1} \quad (7.162)$$

описывает распределение скоростей идеального релятивистского газа кинков, а кинковый форм-фактор B связанный с переменной A (напомним, что для светового рассеяния $A(x; t) = \rho(x; t)$) определяется как

$$B(q) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-qx} A[u_k(x)]. \quad (7.163)$$

Здесь $u_k(x)$ – профиль кинка, так что $B(q)$ убывает на шкале пропорциональной обратной ширине кинка. В нерелятивистском пределе, $k_B T \ll \varepsilon_k$, уравнение (7.160) предсказывает гауссовский пик (7.159), который ограничен малыми значениями k и ω . Заметим, что для высоких температур этот пик может разделиться из-за релятивистских эффектов в $P(v)$.

Иначе, если динамика кинков является броуновской, $\langle [X_j(t) - X_j(0)]^2 \rangle \approx 2D_k t$, уравнение (7.157) приводит к лоренцевскому центральному пику [630], [632]–[634],

$$\widehat{Q}_{AA}(k; \omega) \propto \frac{D_k(\omega) k^2}{\omega^2 + [D_k(\omega) k^2]^2}. \quad (7.164)$$

Таким образом, кинковый вклад в динамических корреляционных функциях дает центральный пик около $k = 0$ и $\omega = 0$. Интенсивности вклада пропорциональна плотности кинков n_{tot} . Ширина пика в k -направлении приблизительно является обратной к ширине кинка d . Для баллистического движения кинков ширина пика в ω -направлении пропорциональна волновому вектору k . Диффузионное движение кинков расширяет центральный пик, расширение будет большим для больших k .

При учете фононных вкладов интенсивность центрального пика уменьшается. С другой стороны фононные пики при $\omega = \pm \omega_A(k)$ должны расширяться в присутствии кинков, так как кинки разрушают когерентность фононной волны из за фазовых сдвигов при их столкновениях [653, 654].

Поведение других динамических корреляционных функций, таких как Q_{ss} , Q_{cc} , $Q_{s/2, s/2}$ является подобным описанному выше (см. работу [519] и приведенные там ссылки).

Молекулярно-динамические моделирования [643, 644] подтверждают что именно кинки ответственны за центральный пик при $k \leq d^{-1}$. Следовательно, измеряя форму центрального пика (гауссову или лоренцеву) можно сделать заключение о характере движения кинков (баллистическом или диффузионном). Более того, в последнем случае мы можем найти коэффициент диффузии $D_k(\omega)$ и наблюдать переход от вязкой (диссипативной) диффузии к аномальной (недиссипативной) диффузии с изменением значений k и ω [635]. Заметим, что neutron spin-echo experiments с одномерными антиферромагнетиком $(\text{CD}_3)_4\text{NMnCl}_3$ (ТММС) дают Лоренцевскую форму центрального пика [655, 656].

Кроме центрального пика, в сильно дискретной ФК цепочке, в которой диффузия кинков является термически активируемой из за присутствия больших ПН барьеров $\varepsilon_{PN} \geq k_B T$, кинки дают добавочный пик при $\omega = \pm \omega_{PN}$ [641].

Кинк-чувствительные корреляционные функции, такие как $Q_{c/2, c/2}$, были изучены в работах [517, 537, 657, 658]. В приближении газа квазичастиц она может быть оценена как

$$Q(x; t) \propto \langle (-1)^{N(x, t)} \rangle \simeq \exp(-\langle N(x; t) \rangle), \quad (7.165)$$

где $N(x, t)$ – полное число кинков и антикинков, траектории которых в плоскости x – t пересекают линейный отрезок $(0, 0) - (x, t)$. Для баллистического движения кинков значение $\langle N(x, t) \rangle$ определяется выражением

$$\langle N(x; t) \rangle = n_{\text{tot}} \int dv P(v) |x - vt|, \quad (7.166)$$

и может быть выражено в терминах функции ошибки. Когда движение кинков является диффузионным уравнение (7.166) должно быть слегка исправлено [632].

7.4 Транспорт массы

Исследование транспорта массы или заряда очень важно для практических приложений модели ФК. Поток атомов может происходить из за градиента концентрации атомов или приложения внешней движущей силы. Первое описывается коэффициентом химической диффузии D_c , а последнее – подвижностью B или коэффициентом коллективной диффузии D_μ . Кроме того, движение отдельного атома описывается коэффициентом самодиффузии D_s . При высоких температурах все коэффициенты диффузии могут быть вычислены с помощью теории возмущения. При низких температурах, однако, мы должны использовать либо молекулярное динамическое моделирование, либо феноменологический подход основанной на идеологии газа квазичастиц. Ниже мы рассмотрим только коэффициенты транспорта массы, хотя модель ФК может быть также использована и для нахождения других кинетических коэффициентов, например, коэффициента теплопроводности ФК цепи [553].

Для того чтобы показать общий подход к задаче, мы начнем с наиболее простого случая цепи свободных атомов, когда потенциал подложки вообще отсутствует. Затем мы опишем теорию возмущения, которая работает для высоких температур, и феноменологический подход, который будет использован для низких температур T . Наконец, мы обсудим зависимость коэффициентов диффузии от температуры и концентрации.

7.4.1 Диффузия в однородном газе

Из за сложности транспортной задачи, давайте сперва рассмотрим случай $V_{\text{sub}}(x) \equiv 0$. В этом случае из уравнений (7.11) и (7.48) следует, что в силу парного характера межатомных взаимодействий, уравнение движения для координаты $Y(t)$ не включает потенциал взаимодействия $V_{\text{int}}(x)$. Следовательно, из уравнения (7.47) мы имеем

$$\bar{D}_\mu(\bar{\omega}) = \bar{D}_f(\bar{\omega}). \quad (7.167)$$

Уравнение (7.167) может быть получено также из разложения в непрерывную дробь (7.72) – (7.75). Таким образом, взаимодействие не влияет на коллективную диффузию и проводимость однородного газа. Однако, химическая диффузия и самодиффузия существенно зависит от характера взаимодействия частиц.

Коэффициент химической диффузии

Для однородного газа коэффициент химической диффузии (7.57) равен

$$D_c = D_f / \chi_0. \quad (7.168)$$

Ранее, в параграфе 6.5.3 были даны выражения для восприимчивости χ_0 для цепи с гармоническим межатомным потенциалом, потенциалом Тоды и потенциалом твердых шаров. Кроме того, для однородного газа стационарный структурный фактор может быть вычислен используя разложение по малому $\beta V_{\text{int}}(x)$. Член второго порядка в $\beta V_{\text{int}}(x)$, $\tilde{\chi}_0(k)$ равен [659]

$$\tilde{\chi}_0(k) \simeq \left\{ 1 + n\beta \tilde{V}_{\text{int}}(k) - \frac{n}{2}\beta^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk'}{2\pi} \tilde{V}_{\text{int}}^*(k' + k/2) \tilde{V}_{\text{int}}(k' - k/2) \right\}^{-1}, \quad (7.169)$$

где

$$\tilde{V}_{\text{int}}(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-ikx} V_{\text{int}}(x). \quad (7.170)$$

Выражение (7.169) является справедливым если взаимодействие $V_{\text{int}}(x)$ достаточно мало по сравнению с $k_B T$ для всех x . Для произвольного $V_{\text{int}}(x)$, но малой плотности атомов n значение $\tilde{\chi}_0(k)$ может быть найдено из среднего значения вириального разложения [659],

$$\tilde{\chi}_0(k) = 1 + n \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-ikx} \left[e^{-\beta V_{\text{int}}(x)} - 1 \right] + O(n^2). \quad (7.171)$$

Заметим, что для гармонического потенциала и потенциала с твердой стенкой стационарный структурный фактор точно известен. Для гармонического потенциала $V_{\text{int}}(x) = \frac{1}{2}g(x - a_A)^2$, подстановка $x_l = la_A + w_l$ дает

$$\begin{aligned} \tilde{\chi}_0(k) &= \sum_l \langle e^{ik(x_l - x_0)} \rangle = \sum_l e^{ikla_A} \langle e^{ik(w_l - w_0)} \rangle \\ &= \sum_l e^{ikla_A} e^{-\frac{1}{2}k^2 \langle (w_l - w_0)^2 \rangle} = \sum_l e^{ikla_A} \exp[-(k^2/2\beta g)|l|] = \\ &= \sinh(k^2/2\beta g) / [\cosh(k^2/2\beta g) - \cos(ka_A)]. \end{aligned} \quad (7.172)$$

Для потенциала с твердой стенкой

$$V_{\text{int}}(x) = \begin{cases} \infty & \text{если } |x| < a_{\text{hc}}, \\ 0 & \text{если } |x| > a_{\text{hc}}, \end{cases} \quad (7.173)$$

где $\frac{1}{2}a_{\text{hc}}$ – радиус твердого ядра, $\tilde{\chi}_0(k)$ равно (например, см. Ref. [660])

$$\tilde{\chi}_0(k) = 1 + 2 \operatorname{Re} \left\{ e^{-ika_{\text{hc}}} [1 + ik(a_{\text{hc}} - a_A)] - 1 \right\}^{-1}. \quad (7.174)$$

Таким образом, коэффициент химической диффузии D_c зависит от знака взаимодействия: для отталкивающего взаимодействия ($V_{\text{int}} > 0$, $\chi < 1$) D_c больше, в то время как для притягивающего взаимодействия ($V_{\text{int}} < 0$, $\chi > 1$), D_c меньше чем D_f .

Коэффициент самодиффузии

Вычисление коэффициента самодиффузии D_s является сложной задачей даже в случае $V_{\text{sub}} = 0$. В сверхвязком случае, $\eta \rightarrow \infty$, удобно использовать метод Мори и уравнение (7.94). Когда взаимодействие является слабым, то разложение до членов второго порядка в $\beta V_{\text{int}}(x)$ дает [659, 661]

$$\Omega_s(k, k) = -iD_f k^2, \quad (7.175)$$

$$M_s(k, k; \bar{\omega}) \simeq in(\beta D_f)^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk'}{2\pi} \frac{(kk')^2 |\tilde{V}_{\text{int}}(k')|^2}{-i\bar{\omega} + D_f[k'^2 + (k - k')^2]},$$

так что функция памяти понижает коэффициент самодиффузии как следует из уравнения

$$D_s \simeq D_f \left\{ 1 - \frac{1}{6} n \beta^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} |\tilde{V}_{\text{int}}(k)|^2 \right\}. \quad (7.176)$$

Таким образом, коллективная природа движения атомов, то есть упоминаемый в параграфе 7.1.5 фактор (iii), препятствует движению данного атома при любом знаке взаимодействия, вопреки поведению коэффициента химической диффузии D_c . Кроме того, Дитерих и Пешель [659] вычислили функцию памяти в пределе низкой плотности атомов, но для произвольного $V_{\text{int}}(x)$.

Когда коэффициент трения η не является большим, вычисление D_s становится очень сложным вследствие инерционных эффектов [661],[662]–[667]. Однако, для гармонического межатомного потенциала можно точно вычислить значение D_s .

Гармоническая цепочка

Для гармонического потенциала, $V_{\text{int}}(x) = \frac{1}{2}g(x - a_A^2)$, уравнения движения в переменных Фурье (7.39) расщепляются,

$$\ddot{u}(\kappa, t) + \eta \dot{u}(\kappa, t) + \omega^2(\kappa) \tilde{u}(\kappa, t) = \delta \tilde{F}(\kappa, t)/m_a, \quad (7.177)$$

$$\langle \delta \tilde{F}(\kappa, t) \delta \tilde{F}(\kappa', t') \rangle = 2\eta m_a k_B T \delta_{\kappa, -\kappa'} \delta(t - t'), \quad (7.178)$$

$$\omega^2(\kappa) = \frac{1}{2} \omega_{\text{max}}^2 (1 - \cos \kappa), \quad \omega_{\text{max}}^2 = 4g/m_a, \quad (7.179)$$

и корреляционная функция $Q_{\dot{u}\dot{u}}$ может быть получена точно

$$\bar{\bar{Q}}_{\dot{u}\dot{u}}(\kappa, \bar{\omega}) = D_f \frac{-i\bar{\omega}\eta}{\omega^2(\kappa) - i\bar{\omega}\eta - \bar{\omega}^2}. \quad (7.180)$$

Из уравнения (7.43) мы получаем, что

$$\bar{D}_s(\bar{\omega}) = \int_{-\pi}^{+\pi} \frac{d\kappa}{2\pi} \bar{\bar{Q}}_{\dot{u}\dot{u}}(\kappa; \bar{\omega}) = \bar{D}_f(\bar{\omega}) \Psi(\bar{\omega}), \quad (7.181)$$

где

$$\Psi(\bar{\omega}) = \left\{ \frac{-i\bar{\omega}(\eta - i\bar{\omega})}{\omega_{\text{max}}^2 - i\bar{\omega}(\eta - i\bar{\omega})} \right\}^{1/2}. \quad (7.182)$$

Заметим что

$$\lim_{\bar{\omega} \rightarrow 0 + i0} \lim_{g \rightarrow 0} \bar{D}_s(\bar{\omega}) = D_f \neq \lim_{g \rightarrow 0} \lim_{\bar{\omega} \rightarrow 0 + i0} \bar{D}_s(\bar{\omega}) = 0. \quad (7.183)$$

Таким образом, для гармонической цепи $D_s = 0$ точно. Динамика отдельно выбранного атома описывается следующими уравнениями [668, 669]

$$\langle (x_l(t) - x_l(0))^2 \rangle \simeq \begin{cases} (k_B T / m_a) t^2 & \text{для } t \ll t_1, \\ 2(k_B T / m_a \omega_1) t & \text{для } t_1 \ll t \ll t_2, \\ 4D_f(\eta t / \pi \omega_{\max}^2)^{1/2} & \text{для } t \gg t_2, \end{cases} \quad (7.184)$$

где $t_1 = \omega_1^{-1}$, $\omega_1 = \max(\eta, \omega_{\max})$, and $t_2 = \omega_2^{-1}$, $\omega_2 = \min(\eta, \omega_{\max}^2 / \eta)$.

Поддиффузионное асимптотическое поведение $\langle (x_l(t) - x_l(0))^2 \rangle \propto \sqrt{t}$ при $t \rightarrow \infty$ является результатом одномерности системы. Так как межатомный потенциал является неограниченной функцией, $V_{\text{int}}(x) \rightarrow \infty$ для $x \rightarrow \pm\infty$, то в одномерной системе атомы не могут проходить друг сквозь друга. Потенциалы Леннарда-Джонса, Тоды и Морса также удовлетворяют этому условию и поэтому они тоже будут приводить к $\sqrt{t}$ долго-временной динамике. В действительных физических системах, однако, межатомный потенциал зависит от абсолютного значения расстояния, $V_{\text{int}}(x) = V_{\text{int}}(|x|)$, а также он должен исчезать на бесконечности, $V_{\text{int}}(x) \rightarrow 0$ когда $x \rightarrow \infty$. Таким образом, если $V_{\text{int}}(0) \neq \infty$, атомы могут проходить друг сквозь друга и коэффициент самодиффузии будет ненулевым,

$$D_s \sim D_f \exp \{ -(na_{\min}) [\beta V_{\text{int}}(0)]^2 \}. \quad (7.185)$$

7.4.2 Приближенные методы

Теперь мы возвращаемся к неоднородной системе. При высоких температурах ее диффузионные свойства могут быть изучены при помощи двух вариантов теории возмущения. Сперва, мы можем начать с предела $V_{\text{sub}}(x) = 0$ (см. параграф 7.4.1) и затем трактовать потенциал $\beta V_{\text{sub}}(x)$ как возмущение. Во вторых, мы можем начать с случая $V_{\text{int}}(x) = 0$ (см. параграф 7.1.4) и рассматривать $\beta V_{\text{int}}(x)$ как малое возмущение. При низкой температуре, однако, когда, как ожидают, главный вклад в диффузионные свойства дают кинки, оба эти подхода теории возмущения терпят неудачу, так как кинки не могут быть получены методами теории возмущения. Поэтому здесь мы должны использовать феноменологический подход.

Разложения теории возмущения

Когда известна intermediate функция рассеяния для однородной системы, $F_0(k; t) \equiv \tilde{G}_\mu^R(k, k; t)$, то потенциал подложки может быть учтен в рамках техники теории возмущения. Применяя формализм проекций Мори к функции $Q_{\dot{Y}\dot{Y}}$, Дитерих и Пешель [659] получили следующее разложение до второго порядка от $\beta V_{\text{sub}}(x)$:

$$\bar{D}_\mu(\bar{\omega}) \simeq D_f \left[1 - i\bar{\omega}/\eta + D_f \sum_j (\beta k_j |V(k_j)|)^2 \bar{F}_0(k_j; \bar{\omega}) \right]^{-1}. \quad (7.186)$$

Здесь $k_j = j(2\pi/a_s)$ – вектор обратной решетки, $j = 0, \pm 1, \dots$, а потенциал подложки разложили в ряд Фурье, $V_{\text{sub}}(x) = \sum_j V(k_j) e^{ik_j x}$, так что для синусоидального $V_{\text{sub}}(x)$ отсюда следует $V(k_j) = \frac{1}{4} \varepsilon_s (\delta_{j,1} + \delta_{j,-1})$. Представление Мори для F_0 является следующим [659]

$$\bar{F}_0(k; \bar{\omega}) = \frac{i\tilde{\chi}_0(k)}{[\bar{\omega} - \Omega_0(k) - M_0(k; \bar{\omega})]}, \quad (7.187)$$

где $\Omega_0(k) = -iD_f k^2 / \tilde{\chi}_0(k)$. Заметим что в сверхвязком случае ($\eta \rightarrow \infty$) функция памяти M_0 с точностью до второго порядка от βV_{int} дается выражением [659]

$$M_0(k; \bar{\omega}) \simeq \frac{i}{2} n (\beta D_f)^2 \int \frac{dk'}{2\pi} \frac{f^2(k, k')}{[-i\bar{\omega} + D_f(k^2/2 + 2k'^2)]}, \quad (7.188)$$

где

$$f(k, k') = k \left[\left(\frac{1}{2} k + k' \right) \tilde{V}_{\text{int}} \left(\frac{1}{2} k + k' \right) + \left(\frac{1}{2} k - k' \right) \tilde{V}_{\text{int}}^* \left(\frac{1}{2} k - k' \right) \right].$$

Если мы пренебрежем функцией памяти M_0 (то есть, если мы проигнорируем коррелированное движение атомов), то D_μ принимает форму [670]

$$D_\mu \simeq D_f \left[1 + \beta^2 \sum_j |V(k_j)|^2 \tilde{\chi}_0^2(k_j) \right]^{-1}. \quad (7.189)$$

Для стандартной модели ФК уравнения (7.189) и (7.172) совпадают с результатом полученным при помощи непрерывной дроби, задаваемым уравнениями (7.72) – (7.75).

Таким образом, изменение в проводимости цепи до второго порядка от $\beta V_{\text{sub}}(x)$ определяется статическим структурным фактором $\tilde{\chi}_0(k)$ взятом векторах взаимной решетки k_j . Функция $\tilde{\chi}_0(k)$ имеет максимум на волновых векторах кратных $k_A \equiv 2\pi/a_A$. Эти максимумы отражают ближний порядок обусловленный межатомным потенциалом $V_{\text{int}}(x)$ [см., например, уравнение (7.172) для гармонического потенциала V_{int}]. Из уравнения (7.189) следует, что коэффициент коллективной диффузии D_μ уменьшается если доминирующий k_j совпадает с k_A , то есть когда парное взаимодействие способствует ближнему порядку, который соизмерим с периодичностью подложки. С другой стороны, D_μ увеличивается если $\tilde{\chi}_0(k_j) < 1$, то есть когда период межатомного взаимодействия несоизмерим с периодом подложки.

Ясно, что $\beta V_{\text{sub}}(x)$ можно трактовать как возмущение только при условии $k_B T \gg \varepsilon_s$. Кроме того, при $k_B T \leq E_k$, E_k – энергия рождения кинка, основную роль в транспорте массы должно играть коллективное движение соответствующее движению кинка как одного целого объекта. Однако, этот эффект полностью игнорируется в уравнении (7.189), а также не учитывается адекватно в уравнении (7.186), так как разложение по возмущению βV_{sub} не может приводить к корректному описанию кинков, которые являются нелинейными возбуждениями. Таким образом, область применимости описанного подхода теории возмущения задается неравенством

$$k_B T \gg \max(\varepsilon_s, E_k). \quad (7.190)$$

Приближение среднего поля

Если потенциал взаимодействия $V_{\text{int}}(x)$ можно рассматривать как малое возмущение, то мы можем обрезать ББГКИ иерархию уравнений для функций распределения на некотором шаге r . Простейшая теория среднего поля (ТСП) предполагает, что

$$W^{(N)}(\{z_l\}; t) = \prod_{l=1}^N W^{(1)}(z_l; t),$$

где $W^{(1)}$ должна удовлетворять одночастичному уравнению Фоккера-Планка-Краммерса с самосогласованным одночастичным потенциалом $V_{\text{sub}}^{\text{MF}}(x)$, определенным уравнением

$$V_{\text{sub}}^{\text{MF}}(x) = V_{\text{sub}}(x) + \int_{-\infty}^{+\infty} dx' V_{\text{int}}(x - x') \rho(x', t). \quad (7.191)$$

Это приближение является адекватным пока только $\beta V_{\text{int}}(x) \ll 1$ для всех x .

Когда межатомный потенциал является неограниченной функцией, например, гармонический потенциал, ТСП должна быть модифицирована способом предложенным by Труллинжером с соавторами [671] и Гайером и Миллером [496]. А именно, распределение ищется в форме

$$W(z; t) = W_{\text{eq}}(z) \prod_{l=1}^N h(z_l; t). \quad (7.192)$$

Анац уравнения (7.192) точно сохраняет равновесные корреляции между атомами, в время как движение различных атомов опять предполагается независимым. Следовательно, это приближение работает только при $k_B T \gg E_k$. В теории твердого тела, такой тип приближения известен как динамическое ТСП, или приближение случайных фаз (ПСФ). ПСФ подход приводит к уравнениям движения, которые подобны уравнениям (7.81)–(7.85) полученным Мунаката и Тсуруи [609].

Труллинжер с соавторами [671] и Гауер и Миллер [496] впервые применили приближение ПСФ к стандартной модели ФК с $\theta = 1$ в сверхвязком пределе ($\eta \rightarrow \infty$). Они получили коэффициент коллективной диффузии D_μ с помощью теории отклика, предполагая, что малая движущая сила F прикладывается к каждому атому и затем вычисляя получающийся поток атомов в установившемся состоянии. Из этого следует, что в пределе $F \rightarrow 0$ значение D_μ определяется уравнением (7.63) где, однако, мы должны подставить эффективный одноатомный потенциал $V_{\text{sub}}^{\text{eff}}(x)$ вместо потенциала $V_{\text{sub}}(x)$. Потенциал $V_{\text{sub}}^{\text{eff}}(x)$ дается уравнением (7.85), $V_{\text{sub}}^{\text{eff}}(x) \propto -k_B T \ln \rho_{\text{eq}}(x)$. Таким образом, вычисление D_μ сводится к нахождению равновесной плотности атомов $\rho_{\text{eq}}(x)$. Функцию $\rho_{\text{eq}}(x)$ можно вычислить точно с помощью техники интеграла перехода [496, 671]. Кроме того, при высоких температурах, $k_B T \gg \varepsilon_s$, можно применить разложение возмущения по $\beta V_{\text{sub}}(x)$; результат совпадает с тем что дает уравнение (7.189). Наконец, если межатомный потенциал является коротко-действующим, например, экспоненциальным,

$$V_{\text{int}}(x) = V_0 e^{-|x|/a_{\text{int}}}, \quad (7.193)$$

тогда при малых и средних концентрациях атомов, когда диапазон парных сил сопоставим или меньше чем среднее расстояние между атомами, т.е. если $a_{\text{int}} \leq a_A$, может быть использован подход типа вириала [670]. А именно, обрезая ББГКИ иерархию для функций распределения $R_{\text{eq}}^{(s)}(u_1, \dots, u_s)$, кладя

$$R_{\text{eq}}^{(2)}(x, x') \simeq R_{\text{eq}}^{(1)}(x) R_{\text{eq}}^{(1)}(x') \exp[-\beta V_{\text{int}}(x - x')], \quad (7.194)$$

мы получим интегральное уравнение для $V_{\text{sub}}^{\text{eff}}(x)$,

$$V_{\text{sub}}^{\text{eff}}(x) = V_{\text{sub}}(x) + k_B T \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \left\{ 1 - e^{-\beta V_{\text{int}}(x-x')} \right\} \rho_{\text{eq}}(x'), \quad (7.195)$$

которое должно быть решено методом самосогласованных итераций. Ясно, что уравнение (7.195) сводится к уравнению (7.191) если $\beta V_{\text{int}}(x) \ll 1$ для всех x .

Если трение η не очень большое, то мы можем решить уравнение ФПК следуя методу Мунаката-Тсуруи (7.81) – (7.88). Шнейдер с соавторами [673] и Ли и Труллинжер [674] вычислили с точностью до порядка η^{-3} коррекцию уравнения Смолуховского конечным трением.

Главный эффект парного взаимодействия состоит в перенормировке эффективного одночастичного потенциала, который видит каждый атом. Как следует из уравнений (7.191) и (7.195), межатомное взаимодействие понижает высоту барьера, $\varepsilon_s \rightarrow \varepsilon_s^{\text{eff}} < \varepsilon_s$, независимо от характера взаимодействия (отталкивания или притяжения) при условии что функция $V_{\text{int}}(x)$ строго выпукла [$V_{\text{int}}''(x) > 0$] и медленно меняется на расстояниях $x \sim a_A$. Сравнив с невзаимодействующим случаем, видим что значение D_μ возрастает с увеличением жесткости взаимодействия $g_A = V_{\text{int}}''(a_A)$ и уменьшением температуры T . Эти вычисления были проведены Мунаката и Тсуруи [609] для потенциала с экспоненциальным отталкиванием (7.193) с $V_0 > 0$ путем численного решения уравнения ФПК (7.83), используя разложение G_μ^W в ряды Фурье по координатам и в Эрмитовы многочлены по импульсам (см. Рис. 7.2).

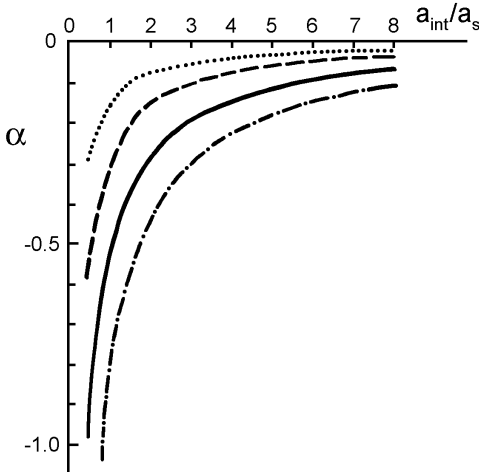


Рис. 7.2. Зависимость амплитуды эффективного одночастичного потенциала $\alpha = (\varepsilon_s^{\text{eff}} - \varepsilon_s)/\varepsilon_s$ от a_{int} для экспоненциального взаимодействия (7.193) при различных значениях температуры $k_B T/\varepsilon_s = 2.0, 1.0, 0.5$, и 0.25 (точечная, пунктирная, сплошная и точечно-пунктирная кривые), и $V_0 = 2\pi\varepsilon_s$, $\eta = \omega_0/2\pi$ [609].

Для взаимодействия с жестким ядром (7.173) ситуация значительно сложнее [659, 670, 675]: проводимость может увеличена или уменьшена относительно случая независимых частиц, в зависимости от отношения диаметра ядра a_{hc} к постоянной подложки a_s (см. Рис. 7.3). Заметим, что результаты периодичны по a_{hc} с периодом a_s . При высоких температурах такое поведение следует из уравнений (7.189) и (7.174). С другой стороны, в пределе низких температур плотность $\rho_{\text{eq}}(x)$ может быть взята в виде суммы δ -функций локализованных на минимумах потенциала $x_m = m a_s$. Тогда, для случая $a_{\text{hc}} < a_s$ эффективный потенциал можно получить из уравнения (7.195), которое приводит к следующему выражению для коэффициента коллективной диффузии [670]

$$D_\mu \simeq D_{\mu 0} \exp \left[\theta \operatorname{sgn} \left(\frac{1}{2} a_s - a_{\text{hc}} \right) \right], \quad a_{\text{hc}} < a_s, \quad (7.196)$$

где $\theta = n a_s$, а $D_{\mu 0}$ обозначает коэффициент диффузии при $n = 0$. Интересно сравнить зависимость (7.196) с предсказаниями модели решеточного газа Ленгмюра, которая запрещает размещение двух и более частиц в одной потенциальной яме. Эта модель дает выражение $D_\mu = D_{\mu 0} (1 - \theta)$, которое является подобным результату уравнению (7.196) для случая когда $\frac{1}{2} a_s < a_{\text{hc}} < a_s$, то есть когда запрещен прыжок атома из одной ячейки

в занятую ближайшую соседнюю ячейку. С другой стороны, когда $0 < a_{hc} < \frac{1}{2}a_s$ так что два атома могут находиться в той же самой яме, скорость ухода частиц будет увеличена в результате их взаимного отталкивания. Согласно уравнению (7.196) взаимодействие с жестким ядром не влияет на энергию активации прыжков (так как $\varepsilon_s^{\text{eff}} - \varepsilon_s \sim k_B T$), но входит в предэкспоненциальный множитель.

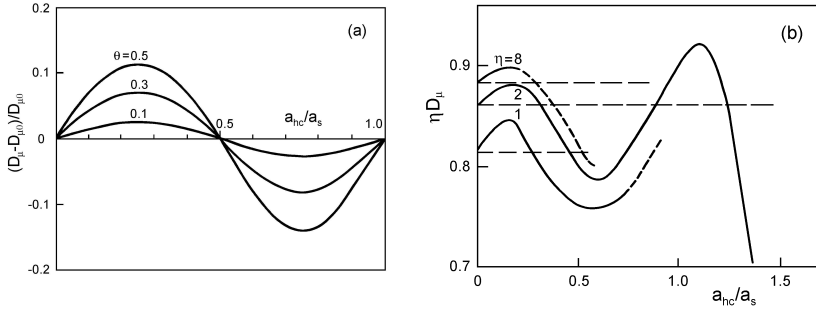


Рис. 7.3. Зависимость коэффициента коллективной диффузии D_μ от диаметра твердого ядра a_{hc} : (а) Результаты для различных концентраций атомов, $\theta = 0.1, 0.3$ и 0.5 , полученные для сверхвязкого случая при $k_B T/\varepsilon_s = 0.5$ [670]; (б) Зависимости ηD_μ от a_{hc}/a_s для $\eta = 1, 2$, и 8 . Кривые получены при численном решении уравнения ФПК для двух атомов, расположенных на синусоидальном потенциале, который был замкнут для того чтобы сформировать кольцо после четырех периодов, так, чтобы $\theta = 1/2$ [675].

Для реалистических межатомных потенциалов, например, если к потенциалу с твердым ядром добавлено кулоновское отталкивание, колебательное поведение D_μ от a_{hc} смазывается и максимумы в $D_\mu(a_{hc})$ подавляются, так как кулоновское отталкивание мешает атомам достигать расстояния жесткого ядра [675].

Выше мы рассмотрели только коэффициент коллективной диффузии D_μ . Коэффициент химической диффузии $D_c = D_\mu/\chi$ можно легко получить используя результаты параграфа 6.5.3 для восприимчивости χ . Вычисление коэффициента самодиффузии D_s , однако, является более сложной задачей из за существенной роли функции памяти (то есть из за коллективного движения атомов). Этот вопрос будет изучен далее в параграфе 7.4.4.

7.4.3 Феноменологический подход

При низких температурах, $k_B T \leq E_k$, когда оба описанных выше подхода теории возмущения перестают работать, мы можем использовать приближение газа квазичастиц. Давайте предположим, что ФК цепочка содержит $N_{\text{tot}} = N_k + N_{\bar{k}}$ кинков и антикинков с координатами $X_j(t)$ и топологическими зарядами σ_j . Смещения атомов можно записать в следующей форме,

$$u_i(t) = u_i^{\text{ph}}(t) + \sum_{j=1}^{N_{\text{tot}}} u_i^{\sigma_j}[X_j(t)], \quad (7.197)$$

где u^σ описывает форму медленно движущегося кинка, а u^{ph} соответствует локализованным фононам. Для $\theta_0 = 1$ и $g \gg 1$ форма кинка

$$u_i^\sigma(X) \simeq 4 \tan^{-1} \exp[-\sigma(la_s - X)/d], \quad (7.198)$$

где $d = a_s \sqrt{g}$ и $a_s = 2\pi$. Из уравнений (7.197), (7.198) мы получаем выражение для скоростей атомов

$$\dot{u}_i(t) = \dot{u}_i^{\text{ph}}(t) + \sum_{j=1}^{N_{\text{tot}}} \dot{X}_j(t) \frac{2\sigma_j}{d} \text{sech} \{ \sigma_j [X_j(t) - la_s]/d \}. \quad (7.199)$$

Подставляя уравнение (7.199) в уравнения (7.45)–(7.48) для $\mathcal{D}_\mu(\bar{\omega})$, мы получим три типа членов. Первый, это вклад от корреляционной функции фононов $\langle \dot{u}^{\text{ph}}(t) \dot{u}^{\text{ph}}(0) \rangle$ формы

$$\mathcal{D}_\mu^{\text{ph}}(\bar{\omega}) = D_f \sum_{\kappa} \frac{i\bar{\omega}\eta}{i\bar{\omega}\eta + \bar{\omega}^2 - \omega_{\text{ph}}^2(\kappa)}, \quad (7.200)$$

где κ нумерует фононные моды с частотами $\omega_{\text{ph}}(\kappa)$. Так как фононный спектр ФК цепи является оптическим, $\omega_{\text{ph}} > 0$, вклад (7.200) стремится к нулю в пределе $\bar{\omega} \rightarrow 0$. Второй, это смешанные корреляционные функции $\langle \dot{u}^{\text{ph}}(t) \dot{X}_j(0) \rangle$ описывающие кинк-фононные взаимодействия. Строгое вычисление этих функций тоже является сложной задачей. В феноменологическом подходе, однако, мы можем предположить, что эти взаимодействия можно учесть косвенно, если концентрация кинков n и коэффициент трения для движущегося кинка вычислены

так, что было учтено кинк-фононное взаимодействие. Наконец, для вычисления третьего вклада, мы предположим, что концентрация кинков мала, $n_{\text{tot}} \ll n$, так что кинки можно рассматривать как независимые квазичастицы, и что

$$\int_0^\infty dt \langle \dot{X}_j(t) \dot{X}_{j'}(0) \rangle = \delta_{jj'} D_k, \quad (7.201)$$

где D_k – коэффициент диффузии для единичного кинка. Затем, подставляя уравнение (7.199) в уравнения (7.45), (7.46), (7.38) и используя континуальный предел, мы получим приближенно, что

$$D_\mu \simeq \frac{1}{N} (\langle N_k \rangle D_k + \langle N_{\bar{k}} \rangle D_{\bar{k}}). \quad (7.202)$$

Таким образом, коллективная диффузия ФК цепочки прямо пропорциональна полной концентрации кинков, $D_\mu \propto \langle n_{\text{tot}} \rangle$ [113, 613, 638]. Для стандартной модели ФК с $\theta_0 = 1$ мы можем взять $D_k = D_{\bar{k}} = k_B T / m \eta$ (m – масса кинка) и $\langle n_{\text{tot}} \rangle$ из уравнений (6.73), (6.93), получая выражение

$$D_\mu = D_f \pi^{3/2} \sqrt{2} (\beta E_k)^{1/2} \exp(-\beta E_k). \quad (7.203)$$

Этот результат впервые получили Бутикер и Ландауэр [676]. Интересно, что формальное применение RPA приближения параграфа 7.4.2 для случая $\beta E_k \ll 1$ и $g \gg 1$, где техника интеграла перехода приводит к аналитически решаемому уравнению Шредингера, приводит к результату подобному уравнению (7.203), за исключением неправильного множителя $(\beta E_k)^{3/2}$ вместо правильного $(\beta E_k)^{1/2}$ [496, 671].

Низкотемпературная проводимость ФК системы может быть вычислена более строго с помощью обобщенной rate theory [247, 525], [676]–[678]. А именно, динамика N -атомной цепи может быть описана как движение точки в N -размерном конфигурационном пространстве. Если мы определим гиперповерхность $E = U(x_1, \dots, x_N)$ в $(N+1)$ -мерном пространстве $(x_1, \dots, x_N, E)$, где U – полная потенциальная энергия системы, то точка будет двигаться на этой гиперповерхности. Движение точки описывается уравнением Ланжевена, которое включает трение и стохастические силы действующие на движущийся атом из тепловой бани. Гиперповерхность имеет бесконечное число минимумов (абсолютных и относительных), максимумов и седловых точек. Затем, давайте введем адиабатическую траекторию, как кривую соединяющую ближайшие соседние абсолютные минимумы, проходящую через седловую точку, и имеющую минимальную энергию E . Если мы предположим, что система движется строго вдоль адиабатической траектории, то ее низкотемпературная динамика может быть описана с помощью одномерной теории Крамерса [603]. Малые отклонения траектории системы от адиабатической могут быть учтены в рамках обобщенной теории переходного состояния [575], [679]–[683] (см. также работу [604]).

При низких температурах скорость динамических процессов будет описываться законом Аррениуса $\mathcal{R} = \mathcal{R}_0 \exp(-\beta \varepsilon_a)$, где энергия активации ε_a дается разностью между полной потенциальной энергией в неустойчивой конфигурации седловой точки, которая должна быть пройдена, и в конфигурации соответствующей абсолютному минимуму U . Предэкспонентный множитель $\mathcal{R}_0$ определяется кривизной гиперповерхности в минимальной и седловой точках и внешним трением η . Обычно затухание является достаточно большим, так что когда система движется из одной конфигурации в другую, она полностью релаксирует в новую конфигурацию до того как произойдет следующий прыжок. Однако, если ФК цепочка является изолированной ($\eta_{\text{ext}} = 0$) и ее параметры близки к полностью интегрируемому СГ случаю (то есть $g \gg 1$), так что внутреннее трение очень мало $\eta_{\text{int}} \ll \omega_0$, то динамика цепочки будет более сложной из-за существования в силу инерционных эффектов “длинных прыжков” точки через несколько минимумов.

В применении этой идеологии к вычислению проводимости ФК цепи нужно предположить, что постоянная движущая сила F приложена к каждому атому и затем использовать теорию отклика. Сила будет двигать кинки направо, а антикинки налево до их возможной рекомбинации при столкновении с другими кинками или аннигиляции на концах цепи. В устойчивом (независящем от времени) состоянии постоянный поток атомов поддерживается непрерывным рождением новых кинк-антикинкковых пар. Таким образом, мы должны вычислить адиабатическую траекторию, которая описывает рождение $k\bar{k}$ пары и последующее движение в противоположных направлениях кинка и антикинка в ПН потенциале.

Для ФК цепочки со слабыми межатомными взаимодействиями ($g \ll 1$) мы имеем $E_k \ll \varepsilon_{PN}$, так что энергия активации ε_a , определяемая высотой ПН барьеров $\varepsilon_{PN} \leq \varepsilon_s$, коэффициент $D_\mu \propto \exp(-\beta \varepsilon_{PN})$ [525]. С другой стороны, когда взаимодействие атомов является сильным ($g \geq 1$), мы имеем $E_k > \varepsilon_{PN}$, и поток атомов ограничен скоростью образования $k\bar{k}$ пар, $D_\mu \propto \exp(-\beta E_k)$ [676, 677].

Для стандартной ФК модели, которая обладает кинк-антикинкковой симметрией, $D_k = D_{\bar{k}}$, уравнение (7.202) может быть переписано в форме

$$D_\mu \simeq \chi D_k, \quad (7.204)$$

где $\chi = \langle n_{\text{tot}} \rangle / \langle n \rangle$. Такой же результат может быть получен в общем случае если концентрация остаточных (“геометрических”) кинков превышает концентрацию термически возбужденных кинков, то есть когда $\langle n_w \rangle \gg \langle n_{\text{pair}} \rangle$. Уравнения (7.204) и (7.57) приводят к соотношению

$$D_c \simeq D_k \text{ (or } D_{\bar{k}}). \quad (7.205)$$

Результат (7.205) имеет простую физическую интерпретацию. Действительно, при $k_B T \leq E_k$ транспорт массы вдоль цепи осуществляется только кинками. Так как концентрация кинков линейно связана с концентрацией атомов, отношение потока кинков к градиенту концентрации кинков точно равно к такому же отношению потока атомов к градиенту атомов. Более того, это утверждение [и, следовательно, уравнение (7.205)] остается верным для любой структуры кинков, то есть, для кинков сконструированных на любой фоновой соразмерной структуре θ_0 , при условии что температура меньше чем температура плавления данной фоновой структуры (см. параграф 6.5.4). Таким образом, вычисление D_c сводится к вычислению коэффициента диффузии кинка D_k для данного θ_0 , то есть, к вычислению параметров кинка m и $V_{PN}(x)$, а затем к решению уравнения Ланжевена

$$m\ddot{X} + m\eta\dot{X} + V'_{PN}(X) = \delta F(t) \quad (7.206)$$

с $\langle \delta F(t) \rangle = 0$ и $\langle \delta F(t) \delta F(t') \rangle = 2\eta m k_B T \delta(t - t')$. Когда можно пренебречь внутренним трением, коэффициент η в уравнении (7.206) совпадает с коэффициентом внешнего трения для изолированного атома, это можно легко получить выполняя операцию $m q \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \dots$ для обеих сторон уравнения движения (7.11) и приняв во внимание определение координаты кинка X . В общем случае мы должны положить $\eta = \eta_{\text{ext}} + \eta_{\text{int}}$. Ясно, чем сложнее элементарная ячейка фоновой структуры θ_0 , тем больше значение внутреннего трения η_{int} для кинков определенных на этой структуре.

Уравнение (7.205) является справедливым, если концентрация кинков настолько мала, что мы можем пренебречь взаимодействием кинков. С увеличением n_{tot} (из за возрастания T или $|\theta - \theta_0|$) нужно также учитывать k - k взаимодействия. Когда энергия взаимодействия $\varepsilon_{\text{int}} = v_{\text{int}}(R)$, R – среднее расстояние между кинками, мала, т.е. когда $\beta\varepsilon_{\text{int}} \ll 1$, это взаимодействие можно учесть при помощи теории возмущения параграфа 7.4.2, рассматривая кинки как квазичастицы. С другой стороны, когда $\beta\varepsilon_{\text{int}} \geq 1$, k - k взаимодействие приводит к формированию решетки кинков (кинковый суперструктуры), и коэффициент D_k в уравнении (7.205) может быть взят как коэффициент диффузии суперкинка определенного на этой суперструктуре. Заметим, что $D_c(\theta) < D_c(0)$ в силу неравенства $\varepsilon_{PN} < \varepsilon_s$.

Когда известен коэффициент D_c , коэффициент коллективной диффузии D_μ может быть получен как $D_\mu = \chi D_c$ для любого покрытия θ . Заметим, что $D_\mu(\theta)$ может быть выше или ниже чем $D_\mu(0)$, в зависимости от значения восприимчивости χ при данном θ . Заметим также что уравнение (7.204) может быть получено прямо из уравнений (7.47), (7.48) если мы перепишем $Y(t)$ в форме

$$Y(t) \simeq C + \frac{1}{q\sqrt{N}} \sum_{j=1}^{N_{\text{tot}}} X_j(t) = C + \left(\frac{N_{\text{tot}}}{q\sqrt{N}} \right) \frac{1}{N_{\text{tot}}} \sum_{j=1}^{N_{\text{tot}}} X_j(t) \quad (7.207)$$

(где C – постоянная) для любой структуры с периодом $a = qa_s$, а затем вспомним, что $\chi \simeq (\langle N_{\text{sk}} \rangle + \langle N_{\bar{\text{sk}}} \rangle) / Nq^2$ при $k_B T \leq E_{\text{sk}}$, где E_{sk} – энергия рождения суперкинка.

7.4.4 Коэффициент самодиффузии

В параграфе 7.4.1 мы показали, что в случае $V_{\text{sub}} \equiv 0$ коэффициент самодиффузии равен нулю если межатомный потенциал является неограниченной функцией, такой как гармонический потенциал, потенциалы Тоды и Морзе. Ясно, что этот результат не будет меняться если мы включим потенциал подложки при помощи теории $\beta V_{\text{sub}}(x)$ возмущения параграфа 7.4.2. Однако, теория $\beta V_{\text{int}}(x)$ возмущения, которая не включает коррелированное движение атомов, приводит к ненулевому значению D_s (например, приближение среднего поля приводит к $D_s = D_\mu$). Кроме того, низко-температурный феноменологический подход также приводит к ненулевому значению D_s . А именно, подставляя выражение (7.197) для случая $g \gg 1$ в уравнения (7.42), (7.43) и пренебрегая кинк-кинковыми корреляциями, мы получим

$$D_s \simeq (a/d)D_\mu, \quad d \gg a. \quad (7.208)$$

Напомним, однако, что кинки одинакового топологического заряда отталкиваются друг от друга согласно экспоненциальному закону на больших расстояниях (см. параграф 3.1), и сталкиваются как упругие диски на коротких расстояниях (см. Рис. 6.7). Рассматривая только подсистему кинков (или только антикинков) мы видим, что те же самые причины, которые приводили к нулевому коэффициенту самодиффузии в свободной гармонической цепи, работают и здесь. Следовательно, выражение (7.208) должно соответствовать ненулевым частотам $\omega > \omega_2$, или коротким временам $t < t_2$, где значение t_2 может быть оценено тем же способом как в уравнении (7.184), если мы будем рассматривать кинки как квазичастицы и применим рассуждения параграфа 7.4.1.

Таким образом, долговременная динамика данного атома в ФК цепочке с неограниченным межатомным потенциалом является субдиффузионной,

$$\langle (u_l(t) - u_l(0))^2 \rangle = \alpha \sqrt{t}, \quad t \rightarrow \infty. \quad (7.209)$$

Коэффициент α в уравнении (7.209) был вычислен Гунтером и Имри [684] и Гилланом [565]. Здесь мы следуем последней работе. Преобразование Фурье потока атомов (7.55) может быть приближенно представлено как

$$\begin{aligned} \tilde{J}(k, t) &= \int dx e^{-ikx} J(x, t) = \sum_l e^{-ikx_l(t)} \dot{u}_l(t) \\ &\simeq \sum_l e^{-ikla_A} \dot{u}_l(t) = N^{1/2} \tilde{u}(ka_A, t). \end{aligned} \quad (7.210)$$

Используя уравнение (7.210) и феноменологический закон (7.59), корреляционная функция скорости (7.40) может быть переписана как

$$\tilde{Q}_{\dot{u}\dot{u}}(\kappa, t) \simeq \left(\frac{\kappa}{a_A} \right)^2 D_c^2 \frac{1}{N} \langle \delta \tilde{\rho}(-\kappa/a_A, t) \delta \rho(\kappa/a_A, 0) \rangle. \quad (7.211)$$

Согласно уравнению (7.91), плотность-плотностная корреляционная функция равна NG_μ^R . Однако, из общей теории корреляционных функций (см., например, книгу [582]) мы знаем, что точный закон сохранения

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} + \text{div} J(x, t) = 0 \quad (7.212)$$

вместе с феноменологическим законом (7.59) приводит к следующему выражению для G_μ^R ,

$$\tilde{G}_\mu^R(k, k; \bar{\omega}) \simeq \frac{i\chi}{(\bar{\omega} + ik^2 D_c)}, \quad \bar{\omega} \rightarrow 0 + i0, \quad k \rightarrow 0. \quad (7.213)$$

Так, в гидродинамическом режиме ($\bar{\omega} \rightarrow 0 + i0$, $ka_A \ll 1$) функция $Q_{\dot{u}\dot{u}}$ принимает форму [565]

$$\tilde{Q}_{\dot{u}\dot{u}}(\kappa, \bar{\omega}) = -D_\mu \frac{-i\bar{\omega}}{-i\bar{\omega} + (\kappa/a_A)^2 D_c}. \quad (7.214)$$

Тогда, выполняя суммирование по κ в уравнении (7.43) положив $\kappa = \nu \Delta\kappa$, $\Delta\kappa = 2\pi/N$, $\nu = -\frac{1}{2}N + 1, \dots, +\frac{1}{2}N$, и предполагая что число $-i\bar{\omega}$ является малым но ненулевым, так что мы можем расширить суммирование по ν до $\pm\infty$, мы получим

$$\bar{D}_s(\bar{\omega}) = -D_\mu \frac{1}{N} \sum_{-\infty}^{+\infty} \frac{A}{A + \nu^2} = -D_\mu \frac{\pi\sqrt{A}}{N \tanh(\pi\sqrt{A})}, \quad (7.215)$$

где $A = N^2(-i\bar{\omega}/D_c)(a_A/2\pi)^2$. В пределе $N \rightarrow \infty$, уравнение (7.215) дает

$$\bar{D}_s(\bar{\omega}) = -\frac{1}{2}\chi a_A (-i\bar{\omega} D_c)^{1/2}, \quad \bar{\omega} \rightarrow 0 + i0. \quad (7.216)$$

Таким образом, при $t \rightarrow \infty$ динамика атома определяется уравнением (7.209) с коэффициентом α данным уравнением

$$\alpha = 2\chi a_A \sqrt{D_c/\pi}. \quad (7.217)$$

Результат (7.209), (7.217) был подтвержден Гилланом и Холовым [552] при молекулярно динамическом моделировании для стандартной модели ФК. Заметим, однако, что когда межатомный потенциал ограничен ($V_{\text{int}}(x) < \infty$ для всех x), тогда D_s будет ненулевым и его значение может быть получено, например, из уравнений (7.79)–(7.82).

7.4.5 Свойства коэффициентов диффузии

Теперь мы можем предсказать поведение коэффициентов диффузии D_μ и D_c как функций от температуры системы T . Для определенности, рассмотрим важный для практики случай $\theta \leq 1$, например когда $\theta = (q-1)/q$ с $q \gg 1$, и предположим, что система близка к стандартной ФК модели, так что ангармоничность межатомных взаимодействий является слабой, то есть

$$\alpha = -(\varepsilon_s/2)^{1/2} V_{\text{int}}'''(a_A) / [V_{\text{int}}''(a_A)]^{3/2} \ll 1.$$

При $T = 0$ основное состояние системы соответствует соразмерной структуре с периодом $a = qa_s$. Суперкинк является топологически устойчивым возбуждением ОС при $T = 0$, с энергией рождения E_{sk} и эффективной массой m_{sk} . Адиабатическое движение суперкинков происходит под действием ПН потенциала $V_{sPN}(X) \simeq \frac{1}{2}\varepsilon_{sPN}[1 - \cos(2\pi X/a)]$ с высотой ε_{sPN} , а малые колебания суперкинков вблизи минимумов ПН потенциала характеризуются частотой $\omega_{sPN} = (\varepsilon_{sPN}/2q^2m_{sk})^{1/2}$. Пусть η_{sk} соответствует коэффициенту эффективного трения для движущегося суперкинка.

Согласно ренормализационным аргументам параграфа 5.2.1, описанное ОС может быть рассмотрено как регулярная решетка $\theta = 1$ антикинков. Когда температура возрастает выше температуры плавления T_{sk} ($k_B T_{sk} \simeq E_{sk}$, см. параграф 6.5.4), эта решетка кинков разупорядочивается из-за теплового рождения большого числа $sk-\bar{s}\bar{k}$ пар. Согласно кинк-решеточной иерархической идеологии параграфа 6.5.4, в температурном интервале $E_{sk} < k_B T < E_k$ равновесное состояние системы может быть рассмотрено как соразмерная структура с периодом a_s , в которой, однако, имеется N_w остаточных кинков и N_{pair} термически возбужденных $k-\bar{k}$ пар. Пусть E_k обозначает энергию рождения $\theta = 1$ кинка, m_k – его эффективную массу, $V_{PN}(X) \simeq \frac{1}{2}\varepsilon_{PN}[1 - \cos(2\pi X/a_s)]$ – ПН потенциал для движущегося $\theta = 1$ кинка, $\omega_{PN} = (\varepsilon_{PN}/2m_k)^{1/2}$ – частоту ПН, а η_k – соответствующее трение. Параметры суперкинка и кинка удовлетворяют двум неравенствам, $\varepsilon_{sPN} < \varepsilon_{PN} < \varepsilon_s$ и $E_{sk} < E_k$. Для определенности, предположим также что E_{sk} является самым низким энергетическим параметром системы (это всегда верно по крайней мере для $q \gg 1$), и что ангармоничность потенциала $V_{\text{int}}(x)$ так мала, что энергия $\varepsilon_{\text{anh}} = \varepsilon_s/2\alpha^2$ является наибольшим из параметров. Теперь мы можем описать функции $D_\mu(T)$ и $D_c(T)$ для различных интервалов температур.

При очень низкой температуре,

$$0 < k_B T < E_{sk}, \quad (7.218)$$

перенос массы вдоль цепи осуществляется суперкинками. Так, согласно феноменологическому подходу параграфа 7.4.3, коэффициент химической диффузии равен

$$D_c \simeq \mathcal{R}_{sk} a^2 \exp(-\beta \varepsilon_{sPN}), \quad (7.219)$$

где

$$\mathcal{R}_{sk} \simeq \begin{cases} \omega_{sPN}/2\pi & \text{если } \eta_{sk} < \omega_{sPN}, \\ \omega_{sPN}^2/2\pi\eta_{sk} & \text{если } \eta_{sk} > \omega_{sPN}, \end{cases} \quad (7.220)$$

в то время как коэффициент коллективной диффузии D_μ определяется уравнением

$$D_\mu \simeq D_c \frac{\langle N_{sk} \rangle + \langle N_{\bar{s}\bar{k}} \rangle}{q^2 \langle N \rangle} \propto \exp[-\beta(\varepsilon_{sPN} + E_{sk})]. \quad (7.221)$$

Когда температура возрастает, $k_B T \sim E_{sk}$, число термически возбужденных $sk-\bar{s}\bar{k}$ пар тоже возрастает, и их взаимное притяжение будет уменьшать реальное значение D_c по сравнению с тем что дает уравнение (7.219).

При низких температурах,

$$E_{sk} < k_B T < \min(\varepsilon_{PN}, E_k), \quad (7.222)$$

суперкинки разрушаются тепловыми колебаниями, но $\theta = 1$ кинки еще существуют, и они теперь отвечают за транспорт массы. Пренебрегая взаимодействием кинков, мы имеем

$$D_c \simeq \mathcal{R}_k a_s^2 \exp(-\beta \varepsilon_{PN}), \quad (7.223)$$

$$\mathcal{R}_k \simeq \begin{cases} \omega_{PN}/2\pi & \text{если } \eta_k < \omega_{PN}, \\ \omega_{PN}^2/2\pi\eta_k & \text{если } \eta_k > \omega_{PN}, \end{cases} \quad (7.224)$$

$$D_\mu \simeq D_c \frac{\langle n_{\text{tot}} \rangle}{\langle n \rangle} \propto \exp[-\beta(\varepsilon_{PN} + E_k)]. \quad (7.225)$$

Взаимное отталкивание остаточных кинков будет слегка увеличивать D_c по сравнению с уравнением (7.223). Заметим, что оба коэффициента D_c и D_μ имеют форму Аррениуса но с различными, но с различными энергиями активации.

Аналогично мы можем описать более сложную ситуацию при $\theta = s/q$ с $2 \leq s \leq q-2$, когда иерархия кинковых решеток состоит из более чем двух температурных интервалов.

Пределы промежуточного температурного интервала зависят от модельного параметра g_A . А именно, когда $g_A \geq 1$, существует температурный интервал

$$\varepsilon_{PN} < k_B T < E_k, \quad (7.226)$$

в пределах которого кинки все еще существуют, но их движение не является активированным. Феноменологический подход предсказывает для этого случая поведение

$$D_c \simeq k_B T / m_k \eta_k \quad (7.227)$$

и

$$D_\mu \simeq D_c \frac{\langle n_{\text{tot}} \rangle}{\langle n \rangle} \propto \exp(-\beta E_k). \quad (7.228)$$

Аналитические предсказания уравнения (7.223) и (7.227) согласуются с молекулярно динамическими результатами Холового и Гиллана [642], Гиллана и Холового [552]. Эти моделирования были выполнены для недемпфированной ФК цепи с $g = 0.127$, так что параметры $\varepsilon_{PN} \simeq 1.10$, $\varepsilon_k \simeq 2.5$ и $m_k \simeq 0.7$. Результаты могут быть объяснены уравнением (7.227) в рамках интервала (7.226), если мы положим $\eta_k \simeq 0.028 \omega_0$ (для недемпфированной системы η_k соответствует только внутреннему трению), и уравнением (7.223) для температурного интервала (7.172) где, однако, моделирование дает предэкспонентный множитель $\simeq 0.4$, в то время как уравнение (7.224) приводит к значению $\simeq 0.1$. Это расхождение может возникнуть из за использования в уравнениях (7.220) и (7.224) одномерной теории вместо более строгой generalized rate theory.

С другой стороны, если $g_A \ll 1$, то для промежуточного температурного интервала

$$E_k < k_B T < \varepsilon_{PN}, \quad (7.229)$$

коэффициенты диффузии могут быть получены только численно с помощью, например, RPA подхода параграфа 7.4.2. Можно ожидать, что для коэффициентов D_c и D_μ будет выполняться закон Аррениуса с энергией активации $\varepsilon_s^{\text{eff}}$, где $\varepsilon_{PN} < \varepsilon_s^{\text{eff}} < \varepsilon_s$.

При высоких температурах мы можем использовать метод теории возмущения параграфа 7.4.2. В частности, для температурного интервала

$$\max(\varepsilon_s, E_k) < k_B T < \varepsilon_{\text{anh}} \quad (7.230)$$

разложение возмущения по $\beta V_{\text{sub}}(x)$ дает

$$D_\mu \simeq D_f \left\{ 1 + \frac{1}{8} \left[\frac{\beta \varepsilon_s \sinh(1/2\beta g)}{\cosh(1/2\beta g) - \cos(2\pi a_A/a_s)} \right]^2 \right\}^{-1}, \quad (7.231)$$

и аналогичное выражение для D_c с множителем $ga_A^2/m_a\eta$ вместо D_f . Наконец, при очень высоких температурах, $k_B T > \varepsilon_{\text{anh}}$, оба потенциала $V_{\text{sub}}(x)$ и $V_{\text{int}}(x)$ становятся несущественными, и коэффициенты диффузии D_μ и D_c будут близкими к значению $D_f \equiv k_B T / m_a \eta$.

Теперь давайте рассмотрим поведение коэффициентов диффузии как функций покрытия $\theta \equiv a_s/a_A$ для стандартной модели ФК. При высоких температурах мы можем использовать разложение возмущения по $\beta V_{\text{sub}}(x)$. Из уравнения (7.231) мы видим, что коэффициент коллективной диффузии $D_\mu(\theta)$ как функция θ совершает колебания, достигая минимумов для тривиальных основных состояний с $\theta = 1/q$ ($q = 1, 2, \dots$), в которых атомы распределены по основаниям потенциальных ям подложки. С другой стороны, максимумы $D_\mu(\theta)$ достигаются при $\theta = 2/(2q-1)$, когда атомы в основном состоянии смещены из оснований потенциальных ям приближаясь к вершинам потенциала. В результате, ожидают, что абсолютный максимум проводимости постоянного поля σ будет при концентрации $\theta \simeq 0.75 - 0.80$ [608]. Максимумы и минимумы $D_\mu(\theta)$ становятся более выраженными с увеличением межатомного взаимодействия и уменьшения температуры.

При низких температурах $k_B T < E_k$, феноменологические соображения приводят к подобному поведению [685]. Действительно, давайте рассмотрим ФК систему с покрытием θ близким к значению $\theta_0 = 1$, $|\theta - \theta_0| \ll 1$, так что взаимодействие между остаточными кинками столь мало, что они не формируют при данной температуре решетку кинков. В этом случае коэффициент химической диффузии D_c равен D_k и он приближенно не зависит от θ . (Заметим, что это утверждение согласуется с результатами численного моделирования Гиллана и Холового [552]. Однако, $D_c(\theta)$ может медленно возрастать с увеличением $|\theta - \theta_0|$ из за k - k отталкивания остаточных кинков). Так как число термически активированных кинков $2N_{\text{pair}}$ приближенно не зависит от θ , в то время как число остаточных кинков $|N_w|$ линейно возрастает с $|\theta - \theta_0|$, восприимчивость $\chi \simeq \langle N_{\text{tot}} \rangle / N$ как функция от θ должна иметь локальный минимум при $\theta = \theta_0$. Следовательно, $D_\mu(\theta)$ будет тоже иметь минимум при $\theta = \theta_0$. Аналогично, $D_\mu(\theta)$ будет иметь локальный минимум при тех соразмерных покрытиях θ_0 , чья температура плавления больше чем T . Ясно, что между локальными минимумами функция $D_\mu(\theta)$ будет иметь локальный максимум. При высоких температурах этот критерий выполняется только для тривиальных покрытий $\theta_0 = 1/q$. Но с уменьшением температуры T будут появляться новые и новые локальные минимумы функции $D_\mu(\theta)$, соответствуя высокоупорядоченным соразмерным структурам, и в пределе $T \rightarrow 0$ функция $D_\mu(\theta)$ должна иметь минимумы на каждом рациональном покрытии θ (конечно, все коэффициенты диффузии стремятся к нулю согласно закону Аррениуса когда $T \rightarrow 0$).

Однако, эксплуатация стандартной модели ФК для целого интервала покрытий от 0 до 1 (или даже до ∞) нежелательна, так как действительный межатомный потенциал $V_{\text{int}}(x)$ не может быть аппроксимирован одной гармонической функцией, когда средние расстояния между атомами изменяются от ∞ до a_s (или даже до 0). Теперь давайте рассмотрим более реалистическую ситуацию, когда потенциал $V_{\text{int}}(x)$ является ангармоничным (например, экспоненциальной или степенной функцией). Когда температура системы T меньше чем температура “плавления” $T_{\text{melt}}(\theta_0)$ для данной структуры θ_0 , тогда транспорт массы вдоль цепи осуществляется кинками (локальными сжатиями цепи) если $\theta = \theta_0 + \delta$, где $\delta \rightarrow +0$, или антикинками (локальными расширениями) если $\theta = \theta_0 - \delta$. Таким образом, $D_c(\theta_0 + \delta) = D_k$ и $D_c(\theta_0 - \delta) = D_{\bar{k}}$. Но для ангармоничного потенциала $V_{\text{int}}(x)$, кинк и антикинк характеризуются различными параметрами (см. параграф 3.5.1). Для примера, ПН барьеры для кинков ниже чем барьеры для антикинков. Так, когда покрытие θ возрастая проходит через θ_0 , энергия активации для химической диффузии скачкообразно уменьшается. Из зависимости $\varepsilon_{PN}(\theta)$, см. Рис. 5.18, следует что зависимость $D_c(\theta)$ должна иметь скачки подобно дьявольской лестнице: значение D_c должно резко увеличиваться каждый раз, когда покрытие θ превышает значение θ_0 , которое характеризует структуру соразмерную с подложкой, имеющую при данном значении T температуру “плавления” выше T [165]. Заметим, что обычно в уравнениях (7.219), (7.220) энергия активации диффузии и, вследствие уменьшения длины пути свободного пробега, предэкспонентный множитель убывают одновременно с ростом концентрации (так называемый эффект компенсации). Ясно, что скачок в $D_c(\theta)$ при данном $\theta = \theta_0$ существует при условии $T < T_{\text{melt}}(\theta_0)$, когда температура возрастает выше $T_{\text{melt}}(\theta_0)$ скачки исчезают. Таким образом, дьявольская лестница будет сглаживаться с возрастанием температуры, так как будут “выживать” только скачки при покрытиях, соответствующих простым соразмерным структурам ($\theta_0 = 1, \frac{1}{2}$, и т.д.).

Все описанные выше подходы могут быть прямо применены к ФК модели с несинусоидальным потенциалом подложки. В частности, в феноменологическом подходе мы должны использовать кинковые параметры E_k , ε_{PN} , и т.д., которые были вычислены для данной формы потенциала $V_{\text{sub}}(x)$. Например, Воафо и др. [686] изучили диффузию кинков для деформируемого потенциала подложки. Однако, некоторые новые свойства появляются в многокинковых системах, где модель допускает существование кинков различных типов. В частности, энергия активации для низко температурной химической диффузии в основном определяется теми кинками, которые имеют наибольший ПН потенциал.

Вынужденная динамика

В этой главе мы рассмотрим ФК цепочку находящуюся под действием внешней силы. Две важные особенности модели, взаимодействие между атомами цепочки и присутствие локального периодического потенциала, делают эту задачу нетривиальной. Одна из важных особенностей вынужденной динамики - это подвижность как функция приложенной силы, которая представляет наибольший интерес для приложений.

8.1 Вводные замечания

Имеется много систем в которых ансамбль частиц находится под действием постоянной внешней силы (называемой также силой постоянного тока или dc силой). Самый известный пример - это электронная или ионная проводимость твердого тела, когда сила, действующая на электроны или ионы возникает из-за приложения электрического поля. Другие примеры это волны зарядовой плотности и цепочки джозефсоновских контактов. Еще одним важным примером является задача трибологии, где тонкий слой атомов (толщиной в несколько ангстремов) ограничен двумя твердыми подложками. Когда подложки находятся в относительном движении, смазочная пленка находится под действием силы из-за фрикционных контактов с поверхностями. Наконец, более специфическим с физической точки зрения примером, является задача транспортного потока автомобилей на дорогах.

Двумя важными компонентами моделей вынужденной динамики являются, во-первых, то что атомы взаимодействуют между собой, и во-вторых, то что атомы находятся под действием внешнего потенциала. Если один из этих компонентов отсутствует, то задача становится тривиальной. Действительно, движение невзаимодействующих атомов эквивалентно движению единичного атома под действием внешнего потенциала и оно описано в параграфе 8.2, в то время как модель без внешнего потенциала сводится, в движущейся системы координат, к свободной динамике.

В данной главе мы рассмотрим модель ФК в которой все атомы находятся под действием постоянной силы (динамика системы под действием периодической силы будет кратко рассмотрена в параграфе 8.10; см. также обзор Флория и Мазо [487] и данные в нем ссылки). Ранее в параграфе 7.4 мы уже обсуждали коэффициент $B_0 = \beta D_\mu$, который определяет линейный отклик ФК цепи, то есть, установившийся поток атомов под действием приложенной постоянной силы F в пределе $F \rightarrow 0$. Теперь мы будем рассматривать случай больших значений силы, когда отклик системы является *нелинейным*. В этом случае подвижность B является функцией от приложенной силы F , так как полный одноатомный потенциал

$$V_{\text{tot}}(x) = V_{\text{sub}}(x) - Fx \quad (8.1)$$

зависит от F . Например, при очень сильных полях $F \gg F_s$, где

$$F_s \equiv \pi \varepsilon_s / a_s, \quad (8.2)$$

для синусоидального потенциала подложки, барьеры $V_{\text{tot}}(x)$ становятся полностью вырожденными и цепочка начинает вести себя как однородная система, так что $B \rightarrow B_f$, где $B_f = \beta D_f = (m_a \eta)^{-1}$. Для вычисления в общем случае зависимости $B(F)$ нужно найти вынужденное решение W_F уравнения Фокера-Планка (или Смолуховского) с периодическим граничным условием, $W_F^{(1)}(x + a_s, p) = W_F^{(1)}(x, p)$, для полной потенциальной энергии $U = \sum_l V_{\text{tot}}(x_l) + U_{\text{int}}$. Тогда $B(F) = j_F / F$, где

$$j_F = \left\{ \int_0^{a_s} \frac{dx}{a_s} \int_{-\infty}^{+\infty} dp \frac{p}{m_a} W_F^{(1)}(x, p) \right\} \left\{ \int_0^{a_s} \frac{dx}{a_s} \int_{-\infty}^{+\infty} dp W_F^{(1)}(x, p) \right\}^{-1}.$$

Наиболее интересными характеристиками системы с внешней силой является зависимость $B(F)$ для случая адиабатически медленного изменения силы F и динамические переходы между различными установившимися состояниями, прежде всего в начале скольжения, то есть переход из пинингованного состояния в состояние скольжения. Зависимость $j_F = B(F)F$ соответствует вольт-амперной характеристике в ионных проводниках и в цепочках джозефсоновских контактов, в то время как для волн зарядовой плотности эта зависимость связана с ампер-вольтной характеристикой. В трибологии, движущая сила F может быть интерпретирована как сила вязкости для данной скорости скольжения.

8.2 Нелинейный отклик невзаимодействующих атомов

Рассмотрим вначале более простой случай невзаимодействующих атомов. броуновское движение невзаимодействующих атомов в периодическом потенциале под действием внешней постоянной силы F было изучено в большом числе работ (см., например, [601, 602, 673, 687], а также книги [595, 596] и приведенные там ссылки). Было показано, что переход от низкой- F подвижности $B_0 = \beta D_\mu$ к высокой- F подвижности B_f сильно зависит от величины коэффициента трения η и температуры системы T . Действительно, действующий на частицу полный потенциал (8.1) является суммой периодического потенциала и потенциала $-Fx$ создаваемого внешней силой, то есть он соответствует наклонной гофрированной поверхности, с наклоном определяемым, как показано на Рис. 8.1, силой F . При малой силе потенциал имеет локальные минимумы, поэтому при нулевой температуре $T = 0$ частица будет находиться в стационарном состоянии с нулевой подвижностью. В противоположность этому, для большой силы $F \geq F_s$, устойчивые состояния отсутствуют и частица скользит по гофрированному потенциалу, достигая максимальной подвижности $B_f = (m_a \eta)^{-1}$.

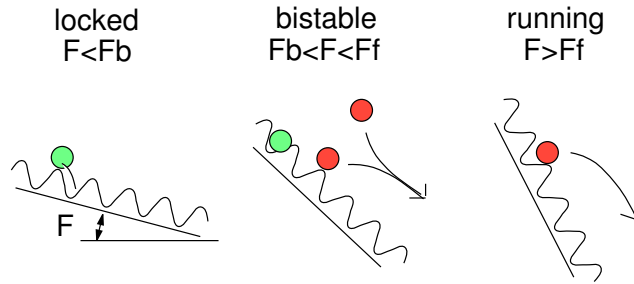


Рис. 8.1. Бистабильность атома находящегося под действием наклонного периодического потенциала.

8.2.1 Предел сильного трения

Переход из пинингованного в скользящее состояние при $F = F_s$ представляет собой пример *седловой бифуркации*, одной из основных концепций теории динамических систем с несколькими степенями свободы. Депенингующее значение силы F_s просто соответствует максимальному наклону потенциала подложки $V_{\text{sub}}(x)$, $F_s = \max_x V'_{\text{sub}}(x) = V'_{\text{sub}}(u_0)$. Ниже порога депининга, $0 < F < F_s$, на один период приходится два стационарных решения ($\dot{x} = 0$): одно устойчивое ($x_s = u_F + ja_s$, где $u_F = \sin^{-1} F$, а j – целое число) и другое (x_u) неустойчивое. В *сверхвязком* пределе, $\eta \rightarrow \infty$, все траектории системы сходятся к траекториям эквивалентных аттракторов $t \rightarrow \infty$, $x(t) - x_s \propto \exp(-t/\tau')$, где время релаксации $\tau' = [m_a/V''_{\text{sub}}(u_F)]^{1/2}$. При возрастании F , устойчивое и неустойчивое решения сливаются в псевдоустойчивое стационарное решение. При $F = F_s$ происходит седловая бифуркация, выше этого значения отсутствуют стационарные решения. Вблизи бифуркации устойчивое стационарное решение ведет себя как $u_F(F) - u_0 \propto (F_s - F)^{1/2}$, а время релаксации τ' расходится при переходе в скользящее состояние,

$$\tau' \propto (F_s - F)^{-1/2}. \quad (8.3)$$

Выше депинингующего значения, но вблизи него траектории сверхвязкой системы проводят большинство своего времени по соседству точек u_0 , где скорости атомов близки к нулю. Время τ затраченное вблизи “точки залипания” u_0 расходится как

$$\tau \sim \int_{u_0-\delta}^{u_0+\delta} \frac{dx}{\dot{x}} \propto (F - F_s)^{-1/2}, \quad (8.4)$$

где $0 < \delta < a_s$. Таким образом, переход в скользящее состояние одно-частичной системы описывается двумя характерными временами, τ' (ниже перехода) и τ (выше перехода), которые расходятся с показателем $\psi = 1/2$. Когда сила убывает выше перехода, средняя скорость $\bar{v}$ стремится к нулю как

$$\bar{v} \propto \tau^{-1} \propto (F - F_s)^{1/2}. \quad (8.5)$$

Уравнение Смолуховского для одного атома в наклонном синусоидальном потенциале (8.1) имеет точное установившееся решение [595] которое дает

$$\frac{B}{B_f} = \frac{k_B T}{F a_s} \frac{A''}{A_+ A_- - A' A''}, \quad (8.6)$$

где

$$A_{\pm} = \int_0^{a_s} \frac{dx}{a_s} \exp \left[\pm \frac{V_{\text{tot}}(x)}{k_B T} \right], \quad (8.7)$$

$$A' = \int_0^{a_s} \frac{dx}{a_s} \int_0^x \frac{dx'}{a_s} \exp \left[\frac{-V_{\text{tot}}(x) + V_{\text{tot}}(x')}{k_B T} \right] \quad (8.8)$$

и

$$A'' = 1 - \exp \left(-\frac{F a_s}{k_B T} \right). \quad (8.9)$$

В пределе линейного ответа, $F \rightarrow 0$, уравнение (8.6) сводится к выражению $B/B_f = I_0^{-2}(\varepsilon_s/2k_B T)$, где I_0 – модифицированная функция Бесселя [см. выше в параграфе 7.1.4 уравнение (7.64)], в то время как в пределе $T \rightarrow 0$ оно дает

$$\frac{B}{B_f} = \begin{cases} 0 & \text{для } F < F_s, \\ [1 - (F_s/F)^2]^{1/2} & \text{для } F > F_s. \end{cases} \quad (8.10)$$

Отметим, что при пороговой силе, $F \rightarrow F_s$, коэффициент эффективной диффузии, определенный как $D = \lim_{t \rightarrow \infty} [\langle x^2(t) \rangle - \langle x(t) \rangle^2]/2t$, значительно превосходит коэффициентом свободной тепловой диффузии [688].

8.2.2 Предел слабого трения

В случае *слабого* трения $\eta < \eta_c \approx 1.193\omega_0$, где $\omega_0 = (2\pi^2\varepsilon_s/m_a a_s^2)^{1/2}$ – частота колебаний у минимума потенциала подложки (в нашей системе единиц $\omega_0 = 1$), система может иметь бегущее решение даже если существует минимум потенциала $V_{\text{tot}}(x)$. Действительно, из-за своего импульса частица может преодолеть следующий барьер, который ниже чем барьер потенциала без добавки $-Fx$, если вклад от потенциальной энергии превосходит потери энергии в течение движения (см. рис. 8.1). Обратный перехода *из скольжения в закрепление* может происходить при меньшей силе, критическое значение силы для этого перехода $F_b < F_s$ (смотри область параметров η и F на рис. 8.2). Это обратное пороговое значение силы F_b может быть найдена из баланса энергий получаемой от движущей силы и потерями энергии на диссипацию. Когда частица проходит дистанцию a_s (один период внешнего потенциала), она получает энергию $E_{\text{gain}} = F a_s$ и теряет некоторую энергию E_{loss} ,

$$E_{\text{loss}} = \int_0^{\tau_w} dt F_{\text{fric}}(t) v(t) = \int_0^{\tau_w} dt m_a \eta v^2(t) = m_a \eta \int_0^{a_s} dx v(x), \quad (8.11)$$

где τ_w – период движения по наклонному потенциалу (то есть время прохода частицей расстояния a_s) и $F_{\text{fric}}(t) = m_a \eta v(t)$ – сила внешнего трения которая вызывает потери. В области установившегося движения эти энергии должны быть равны друг другу $E_{\text{gain}} = E_{\text{loss}}$. Таким образом, обратное пороговое значение силы для перехода из скользящего (бегущего) состояния в неподвижное (закрепленное) состояние определяется условием $F_b = \min(E_{\text{loss}})/a_s$. Минимальные потери достигаются тогда, когда частица имеет нулевую скорость на вершине полного внешнего потенциала (8.1). В пределе $\eta \rightarrow 0$, когда $F \rightarrow 0$, из закона сохранения энергии $(1/2)m_a v^2(t) + (1/2)\varepsilon_s\{1 - \cos[2\pi x(t)/a_s]\} = \varepsilon_s$ мы можем найти скорость частицы $v(x)$ и затем подставить ее в уравнение (8.11). Это приводит к выражению

$$F_b \approx \frac{m_a \eta}{a_s} \left(\frac{\varepsilon_s}{m_a} \right)^{1/2} \int_0^{a_s} dx \left[1 - \cos \left(\frac{2\pi x}{a_s} \right) \right]^{1/2} = C' \eta (\varepsilon_s m_a)^{1/2}$$

и затем к значению

$$F_b \approx C \left(\frac{\eta}{\omega_0} \right) F_s \quad \text{для } \eta \ll \omega_0, \quad (8.12)$$

где $C' \equiv (2\pi)^{-1} \int_0^{2\pi} dy (1 - \cos y)^{1/2} = 2\sqrt{2}/\pi \approx 0.9$ и $C = C' \sqrt{2} = 4/\pi$ являются безразмерными постоянными, которые в общем случае зависят от формы внешнего потенциала. Уравнение (8.12) может быть переписано как $F_b = m_a \eta \bar{v} = (2/\pi) m_a \eta v_m$, где $\bar{v} = a_s^{-1} \int_0^{a_s} dx v(x)$, а $v_m = (2\varepsilon_s/m_a)^{1/2} = \pi \bar{v}/2$ является максимальным значением скорости которое частица достигает когда проходит дно ямы внешнего потенциала $V_{\text{tot}}(x)$. Средняя

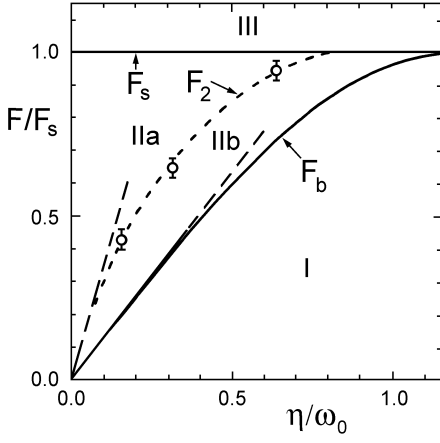


Рис. 8.2. Фазовая диаграмма различных решений одночастичного уравнения ФРК в наклонном синусоидальном потенциале без шума ($T = 0$). Показано: связанное решение (I), бегущее решение (III), и совместно существующие связанные и бегущие решения (II). Если добавить бесконечно малый шум, то бистабильная область (II) разделится на область бегущих (IIa) и связанных (IIb) решений. Пунктирная линия соответствует уравнениям (8.12) и (8.13) [689].

скорость частицы, $\langle v \rangle = \tau_w^{-1} \int_0^{\tau_w} dt v(t) = a_s / \tau_w$, стремиться к нулю когда $F \rightarrow F_b$, так как в этом пределе $\tau_w \rightarrow \infty$, $\tau_w \propto (F - F_b)^{-1/2}$ и $\langle v \rangle \propto (F - F_b)^{1/2}$, подобно уравнениям (8.5) и (8.4) сильно демпфированного предела. Хотя переход от скользящего движения к связанному состоянию является непрерывным, понижение скорости является очень резким при пороговом значении силы $F = F_b$.

Будет ли частица находится в связанном или бегущем состоянии, это зависит от ее начальной скорости. Система обладает бистабильностью и переход между этими двумя состояниями демонстрирует гистерезис из-за инерции [690]. Однако, движение одной частицы под действием внешней силы показывает гистерезис только при нулевой температуре. Бистабильность исчезает в присутствии некоторого внешнего шума, температуры $T > 0$, так как флуктуации могут выбрасывать частицу из зоны связанных или бегущих состояний [689]–[692].

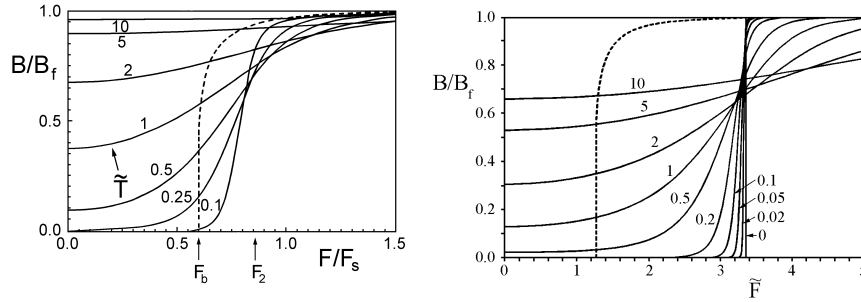


Рис. 8.3. Зависимость стационарной подвижности одного атома в синусоидальном потенциале от внешней силы F , для различных значений безразмерной температуры $\tilde{T} = 2k_B T / \varepsilon_s$ ($\tilde{T} = 0^+ - 10$). Пунктирная кривая соответствует стационарной подвижности бегущих, в отсутствии шума ($T = 0$), атомов, задаваемой уравнением (8.24). Левая панель: зависимость B/B_f от F/F_s для $\eta = 0.5$ вычисленная матричным методом непрерывных дробей [Воллмер (Vollmer) и Рискен (Riskin), 1983]. Правая панель: зависимость B/B_f от $\tilde{F} \equiv F\omega_0 / F_s\eta$ вычисленная аналитически в пределе слабого трения ($\eta \rightarrow 0$) с помощью уравнения 8.25), для $\tilde{T} < 0.1$, и уравнения (8.17), для $\tilde{T} > 0.1$ [595].

Для низких температур, $T \rightarrow +0$, бистабильная область II (см. рис. 8.2) расщепляется кривой $F_2(\eta)$, показанной пунктирной линией на рис. 8.2, на подобласти бегущих и связанных решений (см. также ссылки [595], [693]–[695]). Для слабого трения пороговое значение силы F_2 задается выражением

$$F_2(\eta) \approx C''(\eta/\omega_0)F_s \quad \text{для } \eta \ll \omega_0, \quad (8.13)$$

где $C'' \approx 3.3576$ – безразмерная постоянная [595, 693] (отметим, что постоянную C'' можно аналитически оценить как $C'' \approx 2 + \sqrt{2} \approx 3.4$, см. [696]). Когда $F < F_2$, система в основном находится в связанном состоянии и совершает ползущее (термически активированное) движение с $B(F) \approx B_0$, в то время как при $F > F_2$ система в основном находится в бегущем (скользящем) состоянии и $B(F) \approx B_f$. Таким образом, когда при возрастании сила F пересекает значение F_2 , подвижность $B(F)$, как показано на рис. 8.3, резко меняется от значения B_0 к B_f . Подчеркнем, что при любой малой, но не нулевой температуре, прямой переход из закрепленного в бегущее состояние происходит при пороговом значении силы $F_2 < F_s$, и только при $T = 0$ пороговое значение достигает F_s . Когда температура T возрастает, этот переход смазывается. Таким образом, гистерезис отсутствует при любой температуре $T > 0$. Однако, если F меняется с *конечной* скоростью, то, как будет объяснено ниже,

гистерезис существует. Более того, даже очень малая дополнительная периодическая сила восстанавливает гистерезис, независимо от ее частоты и температуры системы. Механизм гистерезиса в последнем случае связан с возникновением длинных (кратных) скачков атома. Распределение длин и временной продолжительности этих скачков убывает согласно универсальному степенному закону (в случае чисто постоянной силы убывание происходит по экспоненциальному закону).

В случае слабого торможения аналитические результаты известны только в пределе $\eta \rightarrow 0$. Так как они будут использованы также и для модели ФК, то ниже мы кратко приведем эти результаты следуя монографии Рискена [595]. В пределе $\eta \rightarrow 0$ (одновременно нужно взять $F \rightarrow 0$, сохраняя конечным отношение F/η) полезно переписать уравнение ФРК в переменных энергия-координата, где энергетическая переменная $E = (1/2)m_a v^2 + (1/2)\varepsilon_s[1 - \cos(2\pi x/a_s)]$, и затем искать функцию распределения $W_F(\sigma, E, x)$ для решения соответствующего установившемуся состоянию, которая дополнительно зависит от знака скорости $\sigma = \text{sgn}(v/F)$, так что $\sigma = +1$ для атомов двигающихся в направлении действия силы ($v > 0$) и $\sigma = -1$ для атомов двигающихся против силы ($v < 0$). Усредняя по “быстрой” переменной x , получим приведенное распределение $W_F(\sigma, E)$, которое может быть представлено при низких температурах $k_B T \ll \varepsilon_s$ в форме

$$W_F(\sigma, E) \propto \exp[-V_{\text{eff}}(\sigma, E)/k_B T], \quad (8.14)$$

где

$$V_{\text{eff}}(\sigma, E) = \begin{cases} E & \text{for } 0 \leq E \leq \varepsilon_s, \\ E - \sigma(F/\eta) g(E) & \text{for } E > \varepsilon_s, \end{cases} \quad (8.15)$$

а функция $g(E)$ задается интегралом

$$g(E) = \frac{1}{m_a} \int_{\varepsilon_s}^E \frac{dE'}{\bar{v}(E')}, \quad \bar{v}(E) = \frac{2\sqrt{2}}{\pi} \left(\frac{E}{m_a} \right)^{1/2} \mathbf{E} \left[\left(\frac{\varepsilon_s}{E} \right)^{1/2} \right] \quad (8.16)$$

для синусоидального внешнего потенциала.

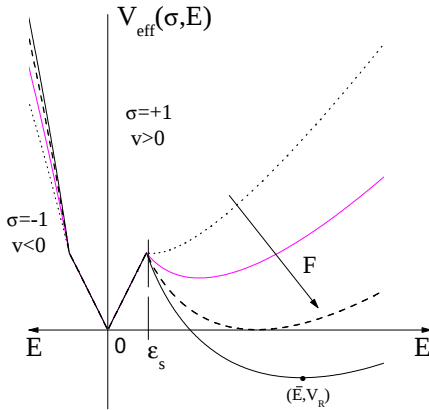


Рис. 8.4. Семейство эффективных потенциалов $V_{\text{eff}}(\sigma, E)$ для различных значений силы F . Точечная кривая, полученная при силе $F = F_b$, соответствует спинодали, когда исчезает нетривиальный минимум потенциала $V_{\text{eff}}(+1, E)$. Пунктирная кривая соответствует бинодали, когда энергии связанного и бегущего состояний совпадают ($F = F_2$).

Функция $V_{\text{eff}}(\sigma, E)$ показана на рис. 8.4. Она имеет минимум $V_L = 0$ при $E = 0$, который описывает связанное состояние, и дополнительно, если сила не очень мала, $F > F_b$, минимум $V_R = V_{\text{eff}}(+1, \bar{E})$ при $E = \bar{E}$, который соответствует двигающемуся состоянию. Минимумы разделены максимумом $V_m = V_{\text{eff}}(+1, \varepsilon_s) = \varepsilon_s$ при $E = \varepsilon_s$. Абсолютный минимум соответствует основному состоянию, а локальный минимум — метастабильному состоянию. Пороговое значение силы F_2 определяется условием равенства энергий этих двух состояний $V_L = V_R$. Так, при силе $F < F_2$ система в основном находится в связанном состоянии, в то время как при $F > F_2$ атом в основном будет находиться в двигающемся состоянии. При низких температурах $k_B T \ll \varepsilon_s$ переход из метастабильного состояния в основное является активируемым процессом, и скорость перехода задается выражениями Крамерса (7.69, 7.70) параграфа 7.1.4. Поэтому, она экспоненциально мала, $\mathcal{R} \sim (\eta \Delta V/k_B T) \exp(-\Delta V/k_B T)$, где $\Delta V = V_m - V_{L,R}$. Следовательно, для любой малой, но не нулевой скорости R изменения движущей силы, система должна демонстрировать гистерезис, ширина которого растет с увеличением R и уменьшением T .

При не слишком низких температурах $\tilde{T} \equiv 2k_B T/\varepsilon_s > 0.1$ это приводит к установившейся подвижности

$$\frac{B}{B_f} = C + D \left(\frac{\eta}{\omega_0} \frac{1}{\tilde{T}} \right)^{1/2}, \quad (8.17)$$

где коэффициенты C и D зависят от F и T ,

$$C = \frac{A_3}{A_0 + A_1}, \quad D = \kappa \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{\pi}} \left[\frac{A_4}{A_0 + A_1} - \frac{F}{m_a \eta \bar{v}_s} \frac{A_2 A_3}{(A_0 + A_1)^2} \right]. \quad (8.18)$$

Здесь безразмерная постоянная $\kappa = 0.855(4)$, $\bar{v}_s = \bar{v}(\varepsilon_s) = (4/\pi)(a_s/2\pi)\omega_0$, $A_0 = (\pi k_B T / 2m_a)^{1/2} I_0(\tilde{T}^{-1})$, а коэффициенты $A_1, \dots, A_4$ определяются интегралами

$$A_1 = \int_{\varepsilon_s}^{\infty} dE \bar{v}'(E) \exp(-E/k_B T) [\cosh h(E) - 1], \quad (8.19)$$

$$A_2 = \int_{\varepsilon_s}^{\infty} dE \bar{v}'(E) \exp(-E/k_B T) \sinh h(E), \quad (8.20)$$

$$A_3 = m_a^{-1} \int_{\varepsilon_s}^{\infty} dE \bar{v}^{-1}(E) \exp(-E/k_B T) \cosh h(E), \quad (8.21)$$

и

$$A_4 = (m_a \bar{v}_s)^{-1} \int_{\varepsilon_s}^{\infty} dE \exp(-E/k_B T) \cosh h(E), \quad (8.22)$$

где $h(E) = Fg(E)/\eta k_B T$ и

$$\bar{v}'(E) = \frac{d\bar{v}(E)}{dE} = \frac{\sqrt{2}}{\pi} \left(\frac{1}{m_a E} \right)^{1/2} \mathbf{K} \left[\left(\frac{\varepsilon_s}{E} \right)^{1/2} \right]. \quad (8.23)$$

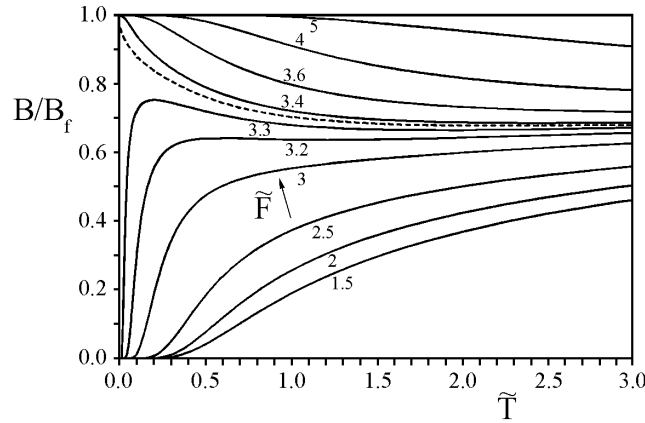


Рис. 8.5. Зависимость подвижности B/B_f от безразмерной температуры $\tilde{T}$, для одиночного атома на синусоидальном потенциале при различных значениях безразмерной силы $\tilde{F} = F\omega_0/F_s\eta$ [595]. Заметим, что при $T \rightarrow 0$ подвижность B экспоненциально мала если $F < F_2$ и близка к B_f если $F > F_2$, в то время как при $F = F_2$ подвижность $B/B_f \approx 0.9960$.

Случай нулевой температуры показан на рис. 8.3 пунктирной кривой, соответствующей решению детерминированного уравнения движения

$$F = m_a \eta \bar{v}(\bar{E}), \quad (8.24)$$

где энергия $\bar{E}$ соответствует (локальному) минимуму функции $V_{\text{eff}}(E)$ в области $E > \varepsilon_s$, то есть энергии движения атома в бегущем состоянии. Уравнение (8.24) описывает только баланс энергетического выигрыша даваемого движущей силой и энергетическими потерями на трение, как было обсуждено выше в начале этого параграфа [см. уравнения (8.11) и (8.12)]. Так как период движения по наклонному потенциалу $\tau_w = \int_0^{a_s} dx/v(x, E) = m_a a_s \bar{v}'(\bar{E})$ согласно уравнению (8.23), то при $T = 0$ подвижность B_R равна $B_R/B_f = \eta/F\bar{v}'(\bar{E})$. В частности, для силы $F = F_2$, когда связанное и движущееся состояния характеризуются той же самой энергией V_{eff} , было найдено, что $\bar{E}/\varepsilon_s \approx 3.32955$ и $B_R/B_f \approx 0.9960$. Наконец, при очень низких температурах, $0 < \tilde{T} < 0.1$, подвижность задается приближенным выражением [595]

$$\frac{B}{B_f} \approx \frac{B_R}{B_f} \left\{ 1 + \left(\frac{\tilde{T} B_R}{2\pi B_f} \right)^{1/2} \exp \left[\frac{V_R}{k_B T} \right] \right\}^{-1}. \quad (8.25)$$

Зависимости $B(F)$, вычисленные с помощью уравнениях (8.17) – (8.25), для различных температур представлены на рис. 8.3 (правая панель), а силы показаны на рис. 8.5.

8.3 Модель ФК в пределе сильного трения

В случае большого или среднего торможения, цепь взаимодействующих атомов ведет себя подобно рассмотренному случаю невзаимодействующих атомов. Более того, в отсутствии внешнего шума (температура $T = 0$) можно получить несколько точных результатов, таких как единственность решения, существования динамической корпусной функции и универсального закона подобия для перехода из связанного в скользящее состояние.

При сильном торможении можно пренебречь инерционным членом и уравнение движения сведется к виду

$$\dot{x}_l = g(x_{l+1} + x_{l-1} - 2x_l) - \sin x_l + F, \quad (8.26)$$

где использовано безразмерное время ($t \rightarrow \eta t$).

Большинство аналитических результатов в сверхвязком пределе было получено из правила “не прохождения” сформулированного Мидлетоном [697]–[700]. Правило утверждает, что диссипативная динамика сохраняет порядок цепи: если в начальный момент времени t_0 $\{x_l(t_0)\} < \{y_l(t_0)\}$, то для всюду в дальнейшем, то есть при $t > t_0$, $\{x_l(t)\} < \{y_l(t)\}$, при условии выпуклости межатомного взаимодействия [например, как для гармонического взаимодействия в классической модели ФК (8.26)]. Действительно, предположим что правило не выполняется, и обозначим через t' самый ранний момент времени при котором некоторый атом (с индексом l') “меньшей” конфигурации $\{x_l(t)\}$ достигает l' -го атома “большой” конфигурации $\{y_l(t)\}$, $x_{l'}(t') = y_{l'}(t')$. Тогда из уравнения (8.26) для относительной скорости будем иметь $\dot{x}_{l'}(t') - \dot{y}_{l'}(t') = g[x_{l'+1}(t') - y_{l'+1}(t') + x_{l'-1}(t') - y_{l'-1}(t')] < 0$, так что пересечение конфигураций является невозможным. Более того, даже если две конфигурации “касаются” друг друга более чем в одной точке $[x_l(t_0) \leq y_l(t_0) \text{ для всех } l]$, но обе конфигурации не совпадают асимптотически либо при $l \rightarrow \infty$ или при $l \rightarrow -\infty$, то они будут отделены на больших временах $t > t_0$, $\{x_l(t)\} < \{y_l(t)\}$.

Давайте определим *ширину* $W(t)$ конфигурации $\{x_l(t)\}$ как максимальное отклонение длины конечного сегмента конфигурации от средней длины: $W(t) = \max_{l,j} |x_{l+j}(t) - x_l(t) - jwa_s|$. Значение W характеризует степень пространственной регулярности цепи. В дальнейшем мы предположим, что все рассматриваемые конфигурации имеют ограниченную ширину. Прямым следствием правила не прохождения является то, что ротационно упорядоченная конфигурация (см. параграф 5.1) остается ротационно упорядоченной при последующем времени (заметим также, что для этих конфигураций $W(t)/a_s < 1$). Следующим важным следствием является единственность средней скорости $\bar{v} = \langle \dot{x}_l \rangle_x$ [здесь $\bar{v} = \langle v(t) \rangle_t = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \tau^{-1} \int_{t_0}^{t_0+\tau} dt v(t)$ и $v(t) = \langle \dot{x}_l(t) \rangle_x = \lim_{N \rightarrow \infty} N^{-1} \sum_{l=l_0}^{l_0+N-1} \dot{x}_l(t)$]: скорость $\bar{v}$ не зависит от начальной конфигурации (но она конечно зависит от значения параметра соразмерности w , постоянной упругости g , и приложенной силы F). Действительно, давайте возьмем две начальные конфигурации $\{x_l(t_0)\} < \{y_l(t_0)\}$, имеющие тоже самое значение параметра w . Тогда, всегда можно найти такую пару целых чисел i и j , что $\{x'_i(t_0)\} = \sigma_{i,j}\{x_l(t_0)\} > \{y_l(t_0)\}$, где преобразование $\sigma_{i,j}$ было определено выше в параграфе 5.1 уравнением (5.5), и правила не прохождения мы получаем неравенство $\{x_l(t)\} < \{y_l(t)\} < \{x'_i(t)\}$ для всех $t > t_0$, таким образом средняя скорость (усредненная по большому времени) обеих траекторий должна быть той же самой.

В силу единственности средней скорости $\bar{v}$, для данного набора параметров w и g любое *установившееся* решение ФК модели с сильным трением является либо связанным (закрепленным) с $\bar{v} = 0$, либо будет скользящим (двигающимся) с $\bar{v} > 0$, независимо от начального состояния. Состояние будет закрепленным при $F < F_{PN}$ и скользящим при $F > F_{PN}$. *Установившееся скользящее состояние является асимптотически единственным* с точностью временного сдвига. Строгое доказательство этого утверждения было дано Мидлетоном [697, 699] (см. также обзор Флория и Мазо [487]). Идея состоит в следующем: нужно строить решение для которого, при любом времени, скорости всех атомов остаются положительными; тогда это решение используется для ограничения любого произвольного решения сверху и снизу, и наконец показать что эти границы приближаются друг к другу при $t \rightarrow \infty$ в силу правила не прохождения. Более того, из этого следует, что *установившееся скользящее состояние является ротационно упорядоченным и имеет везде положительные скорости при любом времени*.

Пусть $\{x_l(t)\}$ является установившимся решением, а i и j – два произвольных целых. Так как $\{x_{l+i}(t)\}$ тоже является установившимся решением, то существует некоторое время τ такое, что $\{x_{l+i}(t)\} = \{x_l(t + \tau)\}$ для всех t . Так как средняя скорость $v(t)$ является периодической функцией с периодом τ (или меньшим), то из соотношений

$$\bar{v}\tau = \langle x_l(t + \tau) - x_l(t) \rangle = \langle x_{l+i}(t) - x_l(t) \rangle = wia_s$$

следует что

$$\left\{ x_{l+i} \left(t - \frac{iwa_s}{\bar{v}} \right) \right\} = \{x_l(t)\} \quad (8.27)$$

для всех t . Подобным способом можно получить, что для всех t

$$\left\{ x_l \left(t - \frac{j a_s}{\bar{v}} \right) + j a_s \right\} = \{x_l(t)\}. \quad (8.28)$$

Оба результата (8.27) и (8.28) могут быть объединены в утверждение, что любое установившееся решение с параметром соразмерности w и средней скоростью $\bar{v}$ является инвариантным относительно преобразования

$$\sigma_{i,j,(iw+j)a_s/\bar{v}}\{x_l(t)\} = \{x_l(t)\} \quad (8.29)$$

для всех t , где $\sigma_{i,j,\tau}$ определяется уравнением $\sigma_{i,j,\tau}\{x_l(t)\} = \{x_{l+i}(t - \tau) + ja_s\}$.

Все выше описанные свойства приводят к результату, что любое установившееся решение в скользящем режиме может быть представлено в форме [701, 702]

$$x_l(t) = h(lwa_s + \bar{v}t + \beta) \quad (8.30)$$

для всех l и t , где $h(x)$ – однозначно определенная действительная функция называемая *динамической корпусной функцией*, а фаза β является любым действительным числом. Функция $h(x)$ является аналитической строго возрастающей функцией, а функция $\phi(x) = h(x) - x$ является периодической с периодом a_s . Множество скользящих состояний в режиме скольжения формируют континуум вследствие наличия в уравнении (8.30) фазы β . В результате этого, *скользящие структуры должны быть бездефектными*, они не допускают дефектов. Для соразмерной структуры с $w = r/s$ скорость $v(t)$ является периодической функцией с периодом $a_s/s\bar{v}$, в то время как для несоразмерной структуры скорость будет постоянной, $v(t) = \bar{v}$. Наконец, в сверх вязкой системе средняя скорость $\bar{v}$ всегда является монотонно возрастающей функцией от F .

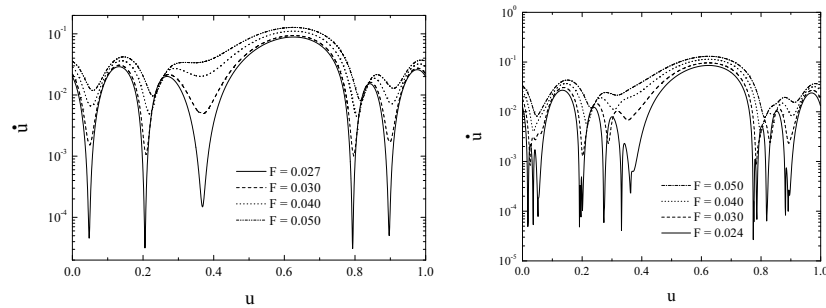


Рис. 8.6. Зависимость скорости атома от их положения в установившемся скользящем состоянии [уравнение (8.31), здесь мы взяли $u = x/a_s$] для различных значений движущей силы F близких сверху к депиннирующей ПН силе сверх вязкой ФК модели. Левая панель: соразмерная структура с $w = 3/5$ при $g = 0.5$ ($F_{PN} \approx 0.026908$); Правая панель: “несоразмерная” структура с $w = 144/233$ при $g = 0.5$ ($F_{PN} \approx 0.023620$) [487].

Депиннирующий переход в сверх вязкой системе происходит по существу тем же самым способом как и в одночастичной системе, через бифуркацию в седловой точке при $F = F_{PN}$. Для *соразмерной* структуры, $w = r/s$, задача сводится к системе с конечным числом s степеней свободы. При депиннирующем переходе, характерные времена τ' и τ расходятся с тем же самым показателем $\psi = 1/2$ подобно уравнениям (8.3), (8.4). В скользящем режиме, когда $F > F_{PN}$, существование динамической корпусной функции $h(x)$ допускает анализ в рамках единственной степени свободы:

$$\dot{x} = g(x), \quad (8.31)$$

где $g(x) = \bar{v}h'(z)$ и $z = h^{-1}(x)$. Функция $g(x)$ периодическая, $g(x + a_s) = g(x)$, и вблизи перехода, имеет s локальных минимумов на одном периоде (см. левую панель рис. 8.6) ассоциированных с положениями атомов пороговой стационарной конфигурации при $F = F_{PN}$. Вблизи перехода движение атомов замедляется в окрестности этих положений, и средняя скорость аналогично одночастичному случаю стремиться к нулю как $\bar{v} \propto (F - F_{PN})^{1/2}$.

В случае *несоразмерной* структуры, выше перехода Обри, т.е. при $g > g_{\text{Aubry}}$, сила ПН $F_{PN} = 0$, и система скользит с постоянной скоростью $v(t) = F$ под действием любой приложенной ненулевой силы (внутреннее фоновое трение в сверх вязкой системе несущественно). С другой стороны, ниже перехода Обри, при $g < g_{\text{Aubry}}$, сила ПН $F_{PN} > 0$, и цепочка будет оставаться закрепленной при силе $F < F_{PN}$. Задача в этом случае сводится к системе с бесконечным числом степеней свободы. Согласно численным результатам Коперсмита [524], Коперсмита и Фишера [702], характерное время τ' (которое является обратным квадратным корнем наименьшего собственного значения соответствующей упругой матрицы) при $F \rightarrow F_{PN}$ как в одночастичной системе *still scales* согласно уравнению (8.3), но теперь имеется распределение собственных векторов с собственными значениями приближающимися к нулю (мягкие моды). Эти мягкие моды являются сильно локализованными и соответствуют атомам которые близки к прыжку через максимум потенциала подложки.

Выше перехода депиннинга, т.е. при $F > F_{PN}$, анализ снова сводится к уравнению от одной переменной (8.31). Как в соразмерном случае, функция $g(x)$ (см. рис. 8.6, правая панель) обладает локальными минимумами с

значениями приближающимися к нулю как линейная функция от $F - F_{PN}$. Таким образом, имеется расходимость времени захвата $\propto (F - F_{PN})^{-1/2}$ связанная с каждым локальным минимумом функции $g(x)$. Важное отличие от соразмерного случая тут состоит в том, что теперь в пределе $F \rightarrow F_{PN}$ *число локальных минимумов расходится* как

$$\propto (F - F_{PN})^{-\psi_\delta} \quad (8.32)$$

с показателем $0 < \psi_\delta < 1/2$. Следовательно, поведение средней скорости $\bar{v}$ несоразмерной структуры при депинингирующем переходе характеризуется критическим показателем ψ_v ,

$$\bar{v} \propto (F - F_{PN})^{\psi_v}, \quad (8.33)$$

где $\psi_v = 1/2 + \psi_\delta$, так что $1/2 < \psi_v < 1$. Говоря интуитивно, расходящееся число локальных минимумов $g(x)$ соответствует положениям атомов стационарной несоразмерной конфигурации при $F = F_{PN}$. Показатель ψ_δ зависит одновременно от параметра w и постоянной упругости g . Следует ожидать что показатель ψ_δ является наибольшим для золотого среднего значения параметра соразмерности, и что он возрастает с приближением g к значению $\frac{1}{2}$ при $g = g_{\text{Aubry}}$, в соответствии с линейным поведением ($\bar{v} = F$) выше перехода Обри.

Простейший случай перехода закрепление-скольжение в системе с одним кинком в сильно дискретном пределе ($g \ll 1$) был детально рассмотрен Карпио и Банилья [703]. Они обнаружили *scaling laws* и асимптотику хвостов кинков при пороговом значении силы $F \sim F_{PN}$.

Наконец, мы хотим упомянуть работу Женга и др. [704], в которой был рассмотрен специфический пример цепочки с градиентной силы. В этой модели уравнение движения имеет форму

$$\dot{x}_l = g(x_{l+1} + x_{l-1} - 2x_l) - \sin x_l + F_l[x], \quad (8.34)$$

где движущаяся сила F_l зависит от координат NN атомов,

$$F_l[x] = r(x_{l+1} - x_{l-1} - 2a_{\min}) \quad (8.35)$$

(здесь r – коэффициент и $a_{\min}$ – равновесная длина пружины). Для тривиальной соразмерной концентрации, когда $x_l = la_s$ и $a_{\min} = a_s$, движущая сила равна нулю. Но если состояние цепи содержит геометрические кинки, они будут в установившемся состоянии двигаться с постоянной скоростью (заметим, что эта модель не имеет истинного основного состояния). Свойства этой модели очень похожи свойствам описанного выше случая движения под действием постоянной силы.

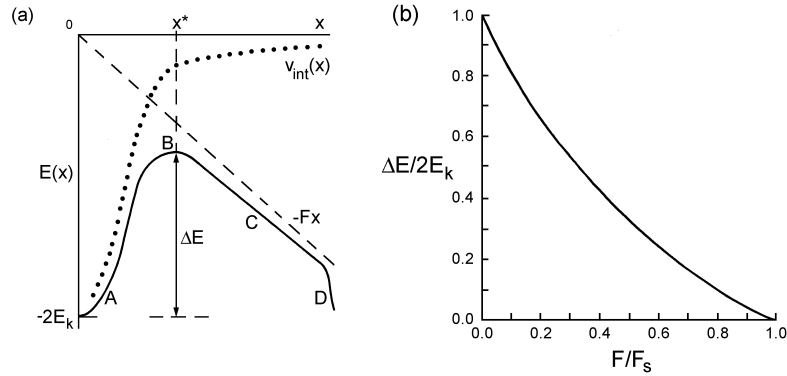


Рис. 8.7. (а) Уменьшение энергии активации ΔE для рождения кинк-антикиновой пары а присутствии движущей силы F . В области (А) энергия должна быть достаточна для того чтобы растащить кинк и антикинк на расстояние критического разделения x^* , которое задается шириной критического ядра (В). В области (С) в энергетическом обмене доминирует приложенная сила а не кинк-антикиновое взаимодействие. В (D) рекомбинация с другим кинком прекращает движение одного из начальных партнеров. (b) Энергии активации ΔE как функция от силы F для модели СГ [676].

При низких температурах ($k_B T < E_k$) можно воспользоваться приближением газа квазичастиц. Повторим, что в этом подходе проводимость цепи поддерживается рождением кинк-антикиновых пар с их последующем движением в противоположных направлениях. Для сильно дискретной ФК цепи, $g \ll 1$, поток атомов ограничивается переходами кинков над ПН барьерами. С возрастанием движущей силы F ПН барьеры уменьшаются [вместе с исходными барьерами потенциала $V_{\text{tot}}(x)$], что приводит к возрастанию одно-кинковой подвижности. Таким

образом, следует ожидать что переход от $B_0 = \beta D_\mu$ к B_f произойдет при силах меньших или равных $F \sim \pi \epsilon_{\text{RN}}/a_s$, аналогично уравнению (8.2).

С другой стороны, В СГ пределе, $g \gg 1$, ограничивающим фактором является скорость рождения кинк-антикиновых пар. При возрастании силы F , энергетический порог для рождения пары будет уменьшаться от $2E_k$ до $\sim 2E_k - Fx^*$, где x^* – седловая точка определенная как решение уравнения (см. рис. 8.7)

$$\frac{d}{dx} [v_{\text{int}}(x) - Fx] = 0, \quad (8.36)$$

$v_{\text{int}}(x)$ – энергия кинк-антикинового притяжения. Таким образом, внешняя сила понижает энергию седловой точки, увеличивая тем самым частоту рождения кинк-антикиновых пар. Этот подход впервые был использован Казанцевым и Покровским [247] для сверхвязкой СГ модели, затем он был далее развит в работах Бутикера и Ландауэра [676], Мунаката [705], Марчесони [706], а также Бутикера и Кристена [678]. Поток атомов был вычислен в рамках обобщенной теории переходного состояния, которая учитывает многомерную природу седловой точки. Теория переходного состояния является адекватной только при $F < F_s$, то есть когда система обладает только активируемой динамикой. Результаты вычислений представлены на рис. 8.8.

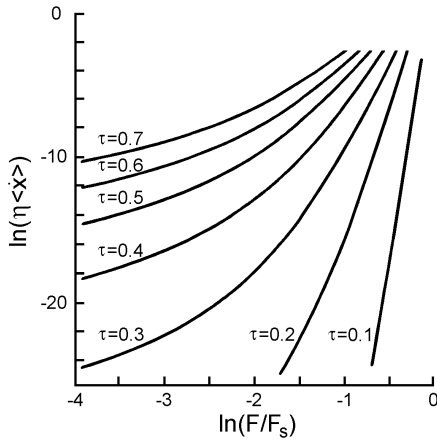


Рис. 8.8. Средняя скорость как функция приложенной силы при различных значениях низкой температуры. Кривые промаркированы значениями $\tau = 8k_B T/E_k$ [676].

При высоких температурах, $k_B T > E_k$, проводимость ФК цепи может быть вычислена с помощью РРА приближения (см. параграф 7.4.2), используя анзац (7.192). Трулингер с соавторами [671], Гайер и Миллер [496] показали, что независящее от времени N -частичное уравнение Смолуховского может быть сведено к одночастичному уравнению с эффективным одноатомным потенциалом $V_{\text{eff}}(x)$, который определяется плотностью атомов $\rho(x)$. Так как плотность $\rho(x)$ сама зависит от V_{eff} (через решение уравнения Смолуховского), то обе функции $V_{\text{eff}}(x)$ и $\rho(x)$ зависят от внешней силы F и задача должна быть решена методом самосогласования. Численные результаты полученные методом трансфер-интеграла, показывают, что при низком внешнем поле и при высоком поле поток атомов пропорционален полю (закон Ома), но для больших F проводимость может быть на несколько порядков больше чем проводимость при малых F . Режим малых F и высоких F разделяется областью сильно нелинейной проводимости, и переход происходит при силах $F \leq F_s$, подобно случаю невзаимодействующих атомов.

8.4 Вынужденное движение кинка

В континуальном приближении динамика системы в присутствии внешней силы описывается возмущенным уравнением СГ-типа

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \eta \frac{\partial u}{\partial t} + V'_{\text{sub}}(u) = \epsilon f(x, t), \quad (8.37)$$

где для синусоидального потенциала подложки $V'_{\text{sub}}(u) = dV_{\text{sub}}(u)/du = \sin u$. Мы уже обсуждали уравнение этого типа в параграфе 3.4.1, где было рассмотрено взаимодействие кинков с примесями.

Используя простую версию метода коллективной координаты, мы будем искать решение уравнения (8.37) в форме возмущенного СГ кинка,

$$u_k(x, t) = 4 \arctan \exp \left\{ -\frac{\sigma [x - X(t)]}{d\sqrt{1 - \dot{X}^2(t)/c^2}} \right\}, \quad (8.38)$$

где $X(t)$ – координата кинка, а d его ширина. Следуя методу Маклафлина и Скотта [86], вначале мы должны вычислить изменение энергии и импульса невозмущенной СГ системы из-за возмущения $\epsilon f(x, t) - \eta u_t$, затем, используя анзац (8.38), вычислить эти изменения в терминах неизвестной функции $X(t)$ и наконец сделать согласующимися эти два способа вычисления. В результате мы получим уравнение

$$\left[1 - \dot{X}^2(t)/c^2\right]^{-1} M[\dot{X}(t)] \ddot{X}(t) + \eta M[\dot{X}(t)] \dot{X}(t) = F(t), \quad (8.39)$$

где

$$F(t) = 2\sigma\epsilon \int_{-\infty}^{+\infty} dx f(x, t) \operatorname{sech}^2[x - X(t)], \quad (8.40)$$

$M(v) = m/\sqrt{1 - v^2/c^2}$, а $m = 2/(\pi^2\sqrt{g})$ – масса покоя кинка. В частности, для движения с торможением под действием постоянной силы, когда $\epsilon f(x, t) = F$, мы получим скорость установившегося состояния

$$v_k = F/[M(v_k)\eta]. \quad (8.41)$$

Этот подход, однако, полностью не учитывает излучение фононов, которое должно возникать из-за разрушения точной интегрируемости уравнения СГ, прежде всего из-за дискретности модели ФК. В следующем параграфе 8.5 мы покажем, что дискретность приводит к неустойчивости быстрого кинка. Несинусоидальная форма потенциала подложки или негармонический характер межатомного взаимодействия тоже изменяют простое соотношение (8.41). Эти эффекты будут описаны ниже в параграфе 8.6, где мы покажем, что ангармонизм взаимодействия приводит к радикальному изменению поведения системы, допуская существование сверхзвуковых и многократных кинков. Ниже мы кратко обсудим роль первого эффекта, то есть динамику кинка в случае несинусоидального потенциала подложки.

Если потенциал подложки является несинусоидальным, но симметрическим как потенциалы рассмотренные детально в параграфе 3.3, то при нулевой температуре динамика кинка под действием постоянной силы может быть все еще описана уравнением (8.41), если использовать соответствующие кинкам массы покоя (в случае несимметрического потенциала подложки обычно возникает специфическая “ратчет” динамика, которая будет рассмотрена в следующей главе 9). Однако, при *ненулевой температуре* в случае многоямного потенциала подложки появляются новые интересные эффекты, а именно для двухъямного потенциала (3.67) (см. рис. 3.13 в параграфе 3.3.4), когда потенциал имеет два особых минимума на один период $a_s = 2\pi$, один при $x_{01} = 0$ и другой при $x_{02} = \pi$, оба с той же самой энергией, но с разной кривизной (шириной). Напомним, что в этих системах форма кинка будет несимметричной, так как его хвосты лежат в долинах с разной кривизной. Здесь модель допускает существование двух типов кинков, называемых “левым кинком” (LK), которые имеют удлиненный левый хвост (с атомами лежащими в “широком”, или “более плоском” потенциальном минимуме) и короткий правый хвост (с атомами в “узком” минимуме), и обратный к нему “правый кинк” (RK). Хотя энергии обоих минимумов равны друг другу, но их *энтропии* при ненулевой температуре различны, ОС с более сильной кривизной имеет меньшую энтропию. Так, при $T > 0$ основное состояние с большей кривизной имеет более высокую *свободную энергию* и поэтому, например, левый кинк будет двигаться вправо под действием “энтропийной силы” $F_e \propto T$, так что в конечной конфигурации все атомы будут в основном занимать более плоскую долину. Этот эффект был впервые описан Савиным и др. [707]. В рамках модели типа ϕ^4 , энтропийная сила была вычислена Константины и Марчесони [709]. Авторы решили псевдо-Шредингеровское уравнение методом трансфер-интеграла (см. параграф 6.5.2) и получили, что

$$F_e(T) \propto - \left(\frac{k_B T}{d} \right) \frac{[\omega_{\min}^{(L)} - \omega_{\min}^{(R)}]}{[\omega_{\min}^{(L)} + \omega_{\min}^{(R)}]}, \quad (8.42)$$

где $\omega_{\min}^{(L,R)}$ – минимальная частота фононов в лево- и право-стороннем ОС. Теперь, если мы приложим постоянную силу F , полная сила $F + F_e(T)$ может быть в зависимости от температуры либо положительна, либо отрицательна и поэтому она будет заставлять кинк двигаться либо вправо, либо влево.

В модели ФК с двухъямным потенциалом (3.67), эффективный потенциал подложки при ненулевой температуре имеет форму двух-барьерного потенциала (см. параграф 3.3.5). Константины и Марчесони [709] обсудили интересный случай двухбарьерного потенциала подложки с узким основным минимумом и широким локальным (метастабильным) минимумом,

$$V_{\text{sub}}(u) \propto \frac{1 - B \cos(2u)}{(1 + A \cos u)}, \quad (8.43)$$

как показано на рис. 8.9 (A и B являются некоторыми параметрами). Теперь при $T = 0$ ОС соответствует конфигурации со всеми атомами расположенными в наиболее глубоком минимуме потенциала $V_{\text{sub}}(u)$ (обозначенного как 1 на рис. 8.9), и элементарное топологическое возбуждение соответствует 2π двойному кинку с хвостами

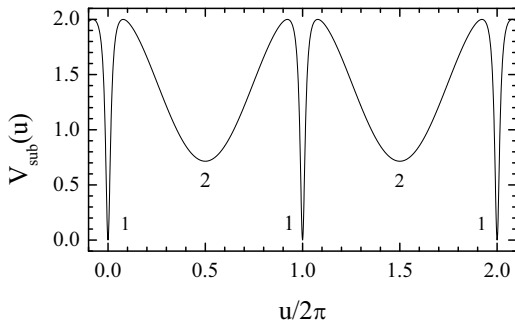


Рис. 8.9. Форма потенциала подложки (8.43) при $A = 0.995$ и $B = 1.01$.

расположенными в соседних основных минимумах. Но если температура возрастает, свободная энергия состояний с атомами в минимумах 1 и 2, $F_i(T) = E_i - TS_i$, будет меняться с разными скоростями, и при некоторой критической температуре $T = T_c$ эти свободные энергии становятся равными друг другу. Следовательно, расстояние между субкинками двойного кинка будет увеличиваться при $T \rightarrow T_c$, и при $T = T_c$ кинк распадется на два отдельных π -кинка. Более того, с дальнейшим ростом температуры эти π -кинки должны снова связаться в один 2π двойной кинк, но теперь уже другой формы, с хвостами расположенными в локальном минимуме 2, так как тепловые колебания при $T > T_c$ делают долины 2 более стабильными чем долины 1.

8.5 Неустойчивость быстрых кинков

Ниже в этой и следующем параграфах мы рассмотрим интересный случай слабого трения, и начнем с более простого случая одного кинка в классической модели ФК, когда межатомное взаимодействие является гармоническим. При нулевой температуре кинк начинает двигаться при силе $F = F_{PN}$. Рассматривая кинк как твердую квазичастицу, мы можем найти его скорость как $v_k = F/m_k\eta$. Однако, здесь появляются три новых особенности. Первое, кинк является деформируемой квазичастицей, так что его масса зависит от скорости кинка. Второе, кинк движется на фоне гармонической цепочки и, поэтому он может возбуждать в ней фононы; это должно приводить к возрастанию коэффициента трения. Третье, кинк может иметь собственные степени свободы которые, будучи возбуждены, могут разрушать установившееся движение кинка при высокой скорости. Первые две особенности уже были рассмотрены в предыдущих главах, поэтому мы в основном будем обсуждать третий эффект.

Движение одиночного кинка, которое начинается с высокой скоростью в сильно дискретной недемпфированной ФК модели было изучено Пейраром и Крускалом [171]. Они нашли два важных феномена. Первое, в течение движения кинк испытывает сильное взаимодействие с фононами; следовательно, при резонансных условиях (то есть, при скоростях кинка в определенных интервалах) движение кинка является строго демпфированным и его скорость быстро убывает, в то время как вне этих резонансных интервалов трение очень слабо и кинк может двигаться с такой скоростью в течение долгого времени. Эффект захвата скорости из-за резонансов частоты прохождения кинком периодов подложки с фононами в конечной ФК цепочке был изучен Устиновым с соавторами [710] и Ватанабе с соавторами [102]. Второе, Пейрар и Крускал обнаружили, что очень быстрый кинк неустойчив, в то время как пара двух связанных кинков может быть устойчива и двигаться как одно целое с очень большими скоростями практически без торможения. Давайте рассмотрим неустойчивостьдвигающегося кинка более детально, следуя работе Брауна и др. [711].

Для классической модели ФК, уравнение движения имеет вид

$$\ddot{x}_l + \eta \dot{x}_l - g[x_{l+1} + x_{l-1} - 2x_l] + \sin x_l = F. \quad (8.44)$$

Для большого значения постоянной упругости, $g \gg 1$, мы можем использовать континуальное предельное приближение, в котором уравнение (8.44) сводится к форме

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - d^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \eta \frac{\partial u}{\partial t} + \sin u = F, \quad (8.45)$$

где $d = a_s \sqrt{g}$ — ширина стационарного кинка (в нашей системе единиц $d = c$). Для случая $F = 0$ и $\eta = 0$, это уравнение сводится к СГ уравнению. Кинковое решение (избыточный атом) имеет форму $u(x, t) = 4 \tan^{-1} \exp[-(x - vt)/d_k(v)]$. СГ кинк может двигаться с любой скоростью $|v| < c$ и характеризуется шириной $d_k(v) = d(1 - v^2/c^2)^{1/2}$ и эффективной массой $m_k(v) = (4/\pi d)(1 - v^2/c^2)^{-1/2}$. Рассматривая кинк как стабильную квазичастицу и предполагая что ее параметры при ненулевых F и η являются такими же как и у СГ кинка,

скорость установившегося движения кинка может быть найдена приближенно из уравнения $v_k = F/\eta m_k(v_k)$, что приводит к зависимости

$$v_k^{(\text{SG})}(F) = c \frac{\pi F}{\sqrt{(\pi F)^2 + (4\eta)^2}}. \quad (8.46)$$

Зависимость (8.46) на рис. 8.10 показана точечной кривой.

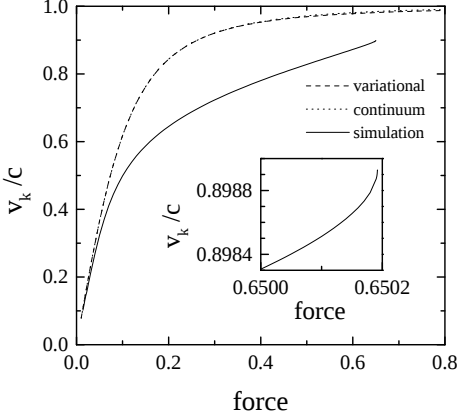


Рис. 8.10. Зависимость скорости кинка v_k от движущей скорости F для $g = 1$, $\eta = 0.1$, и $N = 128$. Пунктирная кривая соответствует СГ зависимости, а точечная кривая – скорости кинка в континуальном приближении.

Ища решение уравнение (8.45) в виде бегущей волны, $u(x, t) = u_k(x - vt) \equiv u_k(z)$, мы получим уравнение

$$(c^2 - v^2) \frac{d^2 u_k}{dz^2} + \eta v \frac{du_k}{dz} - \sin u_k + F = 0. \quad (8.47)$$

Кинковое решение соответствует сепаратрисе уравнения (8.47). Используя безразмерные переменные $\tilde{z} = z/d$, $\tilde{v} = v/c$, и введя $\xi = u_k(\tilde{z})$ и $w(\xi) = u'_k(\tilde{z})$, уравнение (8.47) может быть переписано как

$$\left[(1 - \tilde{v}^2) \frac{dw}{d\xi} + \eta \tilde{v} \right] w(\xi) - \sin \xi + F = 0. \quad (8.48)$$

Кинковое решение должно удовлетворять граничным условиям $u_k(-\infty) = u_F + 2\pi$, $u_k(+\infty) = u_F$, $u'_k(\pm\infty) = 0$, или $w(u_F + 2\pi) = w(u_F) = 0$. Форма кинка может быть получена из функции $w(\xi)$ интегрированием $z = \int_{u_F+\pi}^{u_k(z)} d\xi w^{-1}(\xi)$. Из уравнения (8.48) следует, что функция $w(\xi)$ должна удовлетворять уравнениям

$$\begin{aligned} w'(u_F + 2\pi) &= (-\eta v + D)/2(c^2 - v^2), \\ w'(u_F) &= (-\eta v - D)/2(c^2 - v^2), \end{aligned} \quad (8.49)$$

где $w' \equiv dw/d\xi$, $D = [(\eta v)^2 + 4(c^2 - v^2)\sqrt{1 - F^2}]^{1/2}$. Из уравнения (8.49) прямо следует, что форма кинка движущегося под действием силы будет асимметричной при $F \neq 0$, “голова” кинка является более резкой, в то время как его “хвост” имеет более протяженную форму чем СГ кинк. Однако, в континуальном приближении форма кинка является монотонной для всех значений движущей силы.

Численное моделирование показывает, что скорость кинка в дискретном случае меньше чем скорость в континуальном приближении, так как дискретность приводит к дополнительному (внутреннему) торможению движущегося кинка (см. Рис. 8.10) [заметим, что в конечной (короткой) ФК цепи резонансы частоты биения кинка движущегося по наклонному гофрированному рельефу с фононами приводят к ступенькам в зависимости $v_k(F)$ в силу эффекта захвата скорости, (см. работы [710, 102]). Основное новое явление состоит в том, что хотя в континуальном приближении решение соответствующее установившемуся движению кинка существует при любой силе $F < F_s$ ($F_s = 1$ в наших системных единицах), то в дискретной цепи такое решение существует только при $F < F_{\text{crit}} < F_s$. При больших силах, $F > F_{\text{crit}}$, происходит резкий переход кинка в движущееся состояние. Рисунок 8.11 показывает критическое значение силы F_{crit} и критическое значение скорости v_{crit} как функции внешнего трения η для фиксированного значения величины постоянной упругости g . Неустойчивость имеет место только в случае слабого трения $\eta < \eta_{\text{max}}$, когда кинк может достигать критической скорости, которая близка к скорости звука c , при некоторой силе $F_{\text{crit}} < F_s$. При большом трении максимальная скорость кинка меньше чем c даже в пределе $F \rightarrow 1$, и переход в движущееся состояние происходит только при $F = F_s$, просто из-за того, что минимумы внешнего потенциала исчезают и все атомы начинают двигаться одновременно.

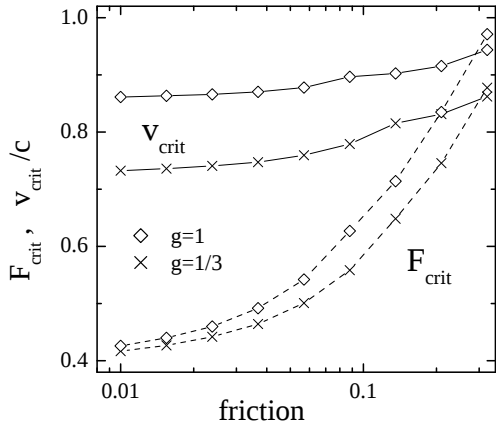


Рис. 8.11. Критическая скорость v_{crit}/c (сплошная кривая) и критическая сила F_{crit} (пунктирная кривая) как функции от коэффициента трения η для двух значений постоянной упругости: $g = 1$ (ромбы) и $g = 1/3$ (крестики), и $N = 256$ [711].

Детальное численное исследование дискретной модели ФК с постоянной внешней силой было проведено Брауном с соавторами [711]. Во первых, было обнаружено, что установившееся состояние движения кинка всегда является “автомодельным”, то есть удовлетворяет условию

$$u_{l+1}(t) = u_l(t - \tau) + a_s, \quad (8.50)$$

так что каждый атом повторяет траекторию движения предыдущего атома с временной задержкой $\tau = a_s/v_k$, то есть динамика системы может быть описана динамической корпусной функцией. Второе, из-за эффектов дискретности хвост кинка имеет сложную внутреннюю структуру, которая имеет пространственные осцилляции с волновым вектором k , определяемым резонансом частоты биения $\omega = v_k$ с фононами. Форма двигающегося кинка при различных значениях силы показана на рис. 8.12. Эти зависимости могут быть представлены как функции от одной независимой переменной $z(F) = l - t/\tau(F)$, где l – индекс атома. В силу условия автомодельности (8.50), зависимость $u_l(t)$ вычисленная на временном интервале $0 < t < N\tau$ только для одного данного атома позволяет нам восстановить эволюцию всех атомов цепи.

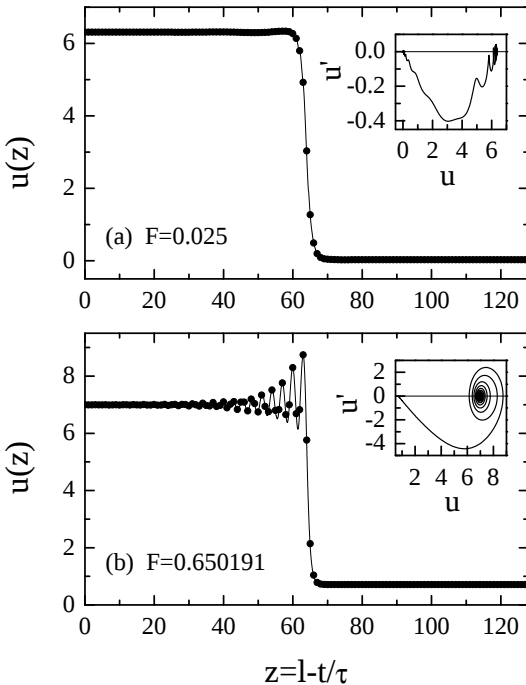


Рис. 8.12. Профиль кинка в дискретной цепи как функция от $z = l - t/\tau(F)$ для (a) малой силы $F = 0.025$ и (b) критической силы $F = 0.650191$. Параметры $g = 1$, $\eta = 0.1$, $N = 128$. Черные круги показывают мгновенное положение атомов, а непрерывная кривая соответствует “автомодельной” curve. На вставке: соответствующие сепаратрисы [711].

Периодичность хвоста кинка может быть объяснена аналогично работе Пейрара и Крускала [171]. Повторим, что без внешнего периодического потенциала модель обладает только одним типом возбуждений – акустическими фононами со спектром $\omega_{\text{ph}}(k) = ck$, где скорость звука $c = 2\pi\sqrt{g}$. Однако, в присутствии внешнего потенциала спектр становится оптическим,

$$\omega_{\text{ph}}^2(k) = \omega_{\text{min}}^2 + 2g(1 - \cos 2\pi k), \quad (8.51)$$

где $\omega_{\text{min}}^2 = (1 - F^2)^{1/2}$, а волновой вектор k должен лежать в первой зоне Бриллюэна $|k| < 1/2$, так что частоты фононов лежат в интервале $\omega_{\text{min}} \leq \omega_{\text{ph}}(k) \leq \omega_{\text{max}}$, где $\omega_{\text{max}}^2 = \omega_{\text{min}}^2 + 4g$. В системе координат, двигающейся совместно с кинком, фононный спектр изменяется из-за эффекта Доплера, $\Omega_{\text{ph}}(k) = \omega_{\text{ph}}(k) - kv_k$. Кинк может сопровождаться стоячей волной (волной движущейся с кинком с той же самой фазовой скоростью) если

$$\Omega_{\text{ph}}(k) = 0. \quad (8.52)$$

Это уравнение, как показано на рис. 8.13, всегда имеет одно или несколько решений в расширенных зонах Бриллюэна, $|k| < \infty$. При больших скоростях кинка, $v_k > 2\omega_{\text{max}}$, это решение соответствует волновому вектору из первой зоны Бриллюэна [см. кривую (с) на рис. 8.13]. При меньших скоростях кинка решение будет лежать во второй зоне Бриллюэна [кривая (b) на рис. 8.13], затем в третьей зоне Бриллюэна, и т.д. В ограниченной Бриллюэновской зонной схеме, где $|k| < 1/2$, мы должны искать решение уравнения $\Omega_{\text{ph}}(k) = nv_k$, где $n = 0, \pm 1, \dots$ соответствует номеру зоны Бриллюэна. Решение с $n = 0$ соответствует резонансу частоты биения $\omega_{\text{wash}} = v_k$ с фононами, а решения с $n \neq 1$ соответствуют уже “супер-резонансам” [712]. На рис. 8.15 показана полученная при численном решении уравнения (8.52) зависимость $k_{\text{res}}(v_k)$. Заметим, при малых скоростях кинка уравнение (8.52) имеет более одного решения. Например, для случая показанного кривой (a) на рис. 8.13, наименьший корень соответствует осцилляциям позади кинка (групповая скорость фононов, $v_{\text{gr}} = d\omega_{\text{ph}}(k)/dk$, отрицательна), а второе – колебаниям впереди кинка ($v_{\text{gr}} > 0$).

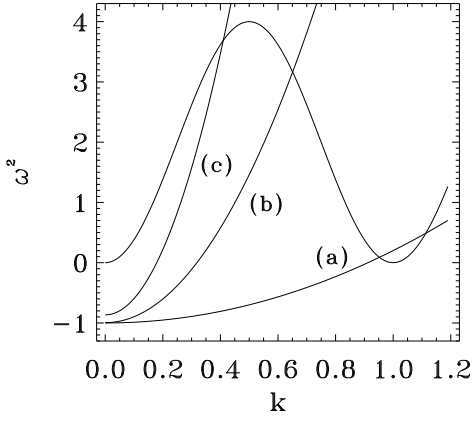


Рис. 8.13. Графическое решение уравнения (8.52) в расширенной схеме зон Бриллюэна для (a) $F = 0.025$, (b) $F = 0.1$, и (c) $F = 0.5$.

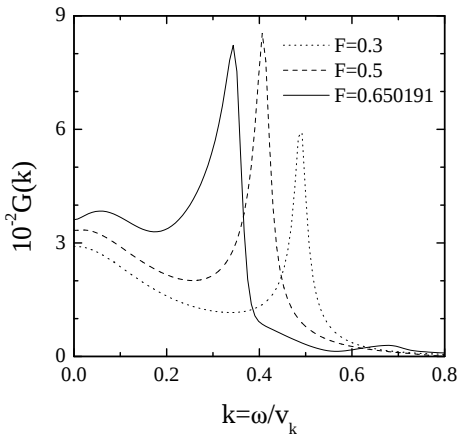


Рис. 8.14. Преобразование Фурье $G(k)$ профиля кинка при $g = 1$, $\eta = 0.1$, и разных значениях силы: (a) $F = 0.3$ ($v_k = 4.543$), точечная кривая; (b) $F = 0.5$ ($v_k = 5.204$), пунктирная кривая; и (c) $F = 0.650191$ ($v_k = 5.648$), непрерывная кривая

Для того чтобы показать, что описанные резонансы ответственны за хвостовые колебания, вычислим пространственное преобразование Фурье профиля кинка,

$$G(k) = \tau^{-1} \int_0^\tau dt \left| \sum_{l=1}^N \dot{u}_l(t) e^{i2\pi lk} \right|. \quad (8.53)$$

Вид функции $G(k)$ показан на рис. 8.14, а положения максимумов функции $G(k)$ для различных значений скорости кинка даны маркерами на рис. 8.15. Из рисунков видно, что коротковолновая компонента колебаний хвоста кинка характеризуется волновым вектором, который совпадает со значением полученным из решения уравнения (8.52) (см. треугольные маркеры на рис. 8.15).

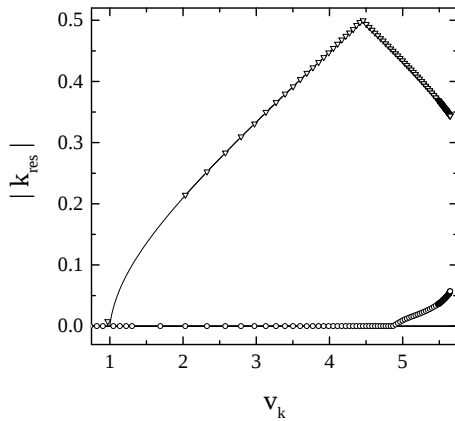


Рис. 8.15. Зависимость $k_{\text{res}}(v_k)$, где k_{res} является решением уравнения (8.52). Треугольные и круглые маркеры показывают положения максимумов преобразования Фурье $G(k)$ формы кинка. Параметр $g = 1$, $\eta = 0.1$.

Для более детального изучения резонансов можно также вычислить функцию отклика $F(k, \omega)$, которая описывает отклик решения соответствующего установившемуся состоянию на малый шум. Это вычисление также показывает, что за колебания хвоста кинка в основном ответственны фононы. Однако, вычисление показывает более важный результат: вблизи критической скорости резонансы растянуты. Это означает, что перед неустойчивостью, возбуждение становится пространственно локализованным. Другой знак того что форма кинка имеет сложную структуру только вблизи критической скорости, следует из преобразования Фурье (8.53) функции $\dot{u}_l(t)$. Как видно из рис. 8.14, вблизи v_{crit} функция $G(k)$ имеет дополнительный пик соответствующий пространственным колебаниям хвоста с малым волновым вектором $k < 0.1$ и частотой $\omega \ll \omega_{\text{min}}$. Эта новая ветвь также показана на рис. 8.15 круглыми маркерами. Эти эффекты могут быть интерпретированы как признак появления профильных мод (дискретного бризера) движущегося дискретного кинка именно перед его разрушением. Такое же заключение также следует из анализа Флоке, детально описанного Брауном с соавторами [711].

В этом контексте мы вспомним, что из-за нелинейности модели ФК, она дополнительно к фононам и кинкам, допускает существование локализованных нелинейных возбуждений, дискретных бризеров (ДБ), которые не переносят массу вдоль цепи, но при высокой амплитуде их колебаний они могут распадаться на кинк-антикинктовую пару. Эти вновь созданные кинки и антикинки затем двигаются независимо и таким образом увеличивая подвижность системы. Кроме того, еще одна особенность модели ФК — существование линейных возбуждений непосредственно самого кинка, профильных (внутренних) мод кинка. Профильную моду можно трактовать как дискретный бризер захваченный кинком как описано Сепульче и Макайем [713]. Существенное отличие захваченного дискретного бризера от свободного состоит в том, что из-за кинка, захваченный бризер является линейно устойчивым возбуждением, в то время как свободный дискретный бризер нуждается в ненулевой пороговой энергии возбуждения.

Таким образом, при большой движущей силе, в хвосте кинка возбуждается локализованная профильная мода (дискретный бризер). С увеличением скорости кинка, амплитуда ДБ также возрастает и при некотором критическом значении скорости ДБ распадается на кинк-антикинктовую пару. *Быстрый кинк становится неустойчивым и излучает антикинк(u).*

Излучение кинк-антикинкковых пар в хвосте быстрого кинка приводит к быстрому переходу в движущееся состояние. Детали этого перехода показаны на рис. 8.16, где мы приводим зависимость $u_l(t)$ от индекса l для разных времен, каждая следующая кривая слегка сдвинута вверх и вправо. Из рисунка видно, что первым событием является рождение новой кинк-антикинкковой пары в хвосте первичного кинка. Только что созданный антикинк движется влево, в то время как первичный кинк и только что созданный кинк создают “двойной” кинк, который движется как одно целое. После этого в хвосте двойного кинка рождается одна или несколько кинк-антикинкковых пар, снова второй антикинк движется влево, в то время как новый кинк плюс двойной кинк образуют “тройной” кинк. Затем, первый *антикинк* создает позади себя одну или несколько кинк-антикинкковых пар. Кинк из этой только что рожденной пары движется направо и встречается с вторым антикинком. После их столкновения обвал системы. Рисунок 8.17 показывает также изменение полной скорости системы $v_{\text{tot}}(t) = \sum_l \dot{u}_l(t)$ в течение этого процесса. Когда образуется первая кинк-антикинкковая пара, скорость v_{tot} увеличивается в два раза (см. детали на вставке рисунка 8.17), затем она снова увеличивается при рождении следующей пары,

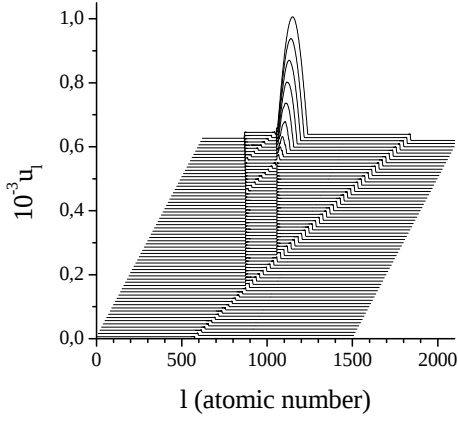


Рис. 8.16. Эволюция системы при $F = 0.651$ стартовая из начального состояния соответствующего установившемуся состоянию при $F = 0.65$, когда $v_k \approx v_{\text{crit}}$. Параметры системы $g = 1$, $\eta = 0.1$, and $N = 1500$.

и наконец, когда начинается обвал, скорость v_{tot} начинает расти линейно от времени со скоростью $2c$, так что оба фронта области движения двигаются со скоростью звука.

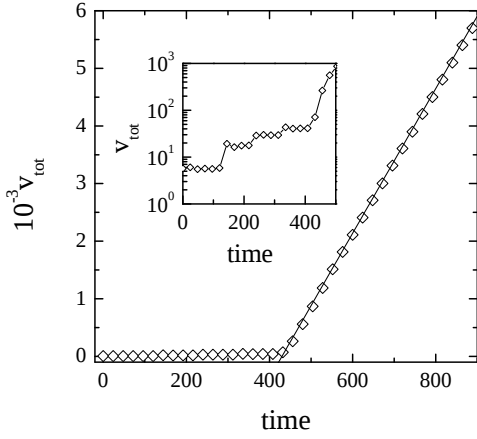


Рис. 8.17. Зависимость от времени скорости системы $v_{\text{tot}}(t)$ при $F = 0.651$. Прямая линия задает асимптотику $v_{\text{tot}}(t) = 2c(t - t_0)$. Вставка: тоже самое в логарифмической шкале.

Моделирование показывает, что в области движения скорости атомов почти постоянны и примерно равны максимальной скорости атомов F/η , и что впереди фронтов области движения, имеется бегущий тройной кинк и двойной антикинк, которые двигаются почти со скоростью звука. Профиль растущей области движущихся атомов $\rho_l(t) = -[u_{l+1}(t) - u_l(t)]/(2\pi)^2$, который описывает избыточную плотность атомов по сравнению с соразмерной структурой, имеет профиль косинуса $\bar{\rho}(x) \propto \sin k_r(x - x_c)$, где x_c – центр области движения, а $k_r^2 = -\langle \cos u(x, t) \rangle \ll 1$.

Наконец заметим, что при очень малом трении $\eta \ll \omega_0$, и/или в сильно дискретной системе, когда $g \ll 1$, так что F_{PN} близка к F_s , кинк может достигать критической скорости сразу когда он начинает двигаться, а переход из закрепленного состояния в движущееся будет происходить при $F = F_{PN}$.

Выше мы обсудили случай нулевой температуры. При низкой, но ненулевой температуре T кинк совершает ползущее (активированное тепловыми колебаниями) движение при слабой силе, где $B \propto \exp(-\varepsilon_{PN}/k_B T)$, и начинает скользить при высокой силе. Подвижность B в этом случае может быть вычислена приближенно с помощью уравнений (8.17) – (8.25) для одно-частичного случая описанного выше в параграфе 8.2.2, если рассмотреть кинк как твердую квазичастицу массы m_k двигающуюся в периодическом ПН потенциале. В частности, переход между режимами ползущего движения и движения скользящего кинка происходит либо при пороговом значении силы F_{PN} , или при всегда меньшей силе [714] $F_{2PN} \approx C'''(\eta/\omega_{PN})F_{PN}$, подобно уравнению (8.13) для одно-атомного случая. Кроме того, если размер системы не является очень малым, то в ней могут термически активироваться кинк-антикиновые пары, поэтому область двигающихся атомов начинает расти сразу же, как только быстрый кинк становится неустойчивым.

8.6 Сверхзвуковые кинки и многокинковые структуры

В реалистических системах межатомное взаимодействие обычно нелинейно. Как было показано ранее, ангармоничность разрушает кинк-антикинктовую симметрию классической модели ФК. Это может изменить, при достаточно сильной ангармоничности, сценарий перехода в движущееся состояние. Например, если критическое значение силы для антикинка меньше чем значение для кинка, лавина двигающихся атомов начнет расти сразу же после рождения новой кинк-антикинктовой пары в хвосте движущегося исходного кинка. Кроме того, для модели ФК с постоянной внешней силой ангармоничность приводит к двум новым интересным эффектам. Напомним, что в классической модели ФК топологические возбуждения всегда являются дозвуковыми, кинк не может двигаться со скоростью v_k большей чем скорость звука c из-за Лоренцовского сжатия ширины кинка. Более того, в классической модели ФК, кинки одинакового топологического заряда отталкиваются друг от друга и, следовательно, они не могут нести кратный топологический заряд. Как мы покажем в данном параграфе, в *ангармоничной* модели могут существовать и сверхзвуковые кинки и кратные кинки.

Движение топологических солитонов с *сверхзвуковыми* скоростями впервые было предсказано аналитически Косевичем и Ковалевым [273] в модели ФК с некоторым специфическим межатомным взаимодействием в континуальном приближении (см. параграф 3.5.1). Позже, сверхзвуковые топологические солитоны наблюдали Бишоп и др. [715] при молекулярно динамическом изучении полиацетилена. Затем сверхзвуковые кинки были изучены Савиным [271] численно в дискретной модели ϕ^4 с ангармоничным взаимодействием. Было показано, что для определенных значений скоростей сверхзвукового кинка, когда его ширина становится равной с шириной солитона уравнения Буссинеска, кинк движется почти без энергетических потерь. Позже подобные результаты были получены Золотарюком и др. [272] для экспоненциально взаимодействующих атомов расположенных на синусоидальном потенциале подложки (см. детали в параграфе 3.5.1).

Кратные быстрые (но дозвуковые) кинки впервые были обнаружены численно Пейраром и Крускалом [171] в классической сильно дискретной ФК модели без трения (см. параграф 3.2.4). Авторы объяснили устойчивость двойного кинка как результата “компенсации” волнового излучения двух единственных кинков, когда эти волны находятся в противофазе. Волны подавляют друг друга, так что составной двойной кинк движется почти без излучения. Эта проблема была позже изучена Савиным и др. [179], была найдена численно иерархия состояний двойного кинка характеризуемая различными расстояниями между двумя единичными кинками. Авторы обнаружили, что эти состояния являются динамически устойчивыми при определенных (предпочтительных) значениях скорости. Такие же результаты были получены раньше Устиновым и др. [716] для ФК цепи с гармоническим межатомным взаимодействием при наличии внешней силы и слабого трения (см. рис. 8.18). Авторы численно обнаружили несколько “связанных” состояний двух 2π -кинков, которые отличаются друг от друга числом колебаний в области между двумя связанными кинками. Такой “резонанс” связанных состояний существует для определенных интервалов значений движущей силы, которые могут перекрываться. Скорость двойного кинка всегда выше скорости единственного кинка из-за уменьшения потерь на излучения. К сожалению, устойчивость этих связанных состояний не была детально изучена, хотя авторы и пытались объяснить образование двухкинкового связанного состояния через взаимодействие колеблющихся хвостов кинков. Затем, Алфимов и др. [302] показали, что кратные кинки существуют также в континуальных системах с *нелокальным* взаимодействием. Связанные состояния кинков (как дозвуковых, так и сверхзвуковых) в случае ангармоничного взаимодействия были также численно изучены Золотарюком и др. [272]. Было найдено, что эти кратные кинки динамически устойчивы, но неустойчивы асимптотически (см. рис. 3.5.1). Динамика обобщенной цепочки ФК под действием постоянной внешней силы была численно изучена Брауном и др. [190, 717]. Было показано существование сверхзвуковых кинков и кратных (двойных и по крайней мере тройных) кинков. Наконец, существование кратных кинков при определенных значениях скорости в *дискретной* модели ФК было строго доказано by Чамписом и Кившарем [182].

Ниже мы покажем, следуя работе Брауна [718], что модель ФК допускает одновременно *сверхзвуковые кинки* и *кратные кинки*, если выполнены следующие три условия: первое, модель должна быть *дискретной*; второе, так как движение кинка в дискретной цепи тормозится из-за излучения фононов, должна быть приложена *движущая сила* для поддержания движения; и третье, межатомное взаимодействие должно быть *ангармоничным*. Как пример, мы рассмотрим модель ФК

$$\ddot{x}_l(t) + \eta \dot{x}_l(t) + \frac{\partial}{\partial x_l} \{V[x_{l+1}(t) - x_l(t)] + V[x_l(t) - x_{l-1}(t)]\} + \sin x_l(t) = F, \quad (8.54)$$

с экспоненциальным межатомным взаимодействием

$$V(x) = V_0 e^{-\beta x}. \quad (8.55)$$

В континуальном приближении ([7]; см. параграф 1.1), уравнение движения сводится к форме

$$\ddot{u} + \eta \dot{u} - d^2 u'' (1 - \alpha d u') + \sin u - F - h^2 \left[\ddot{u}'' + (u')^2 \sin u - u'' \cos u \right] = 0, \quad (8.56)$$

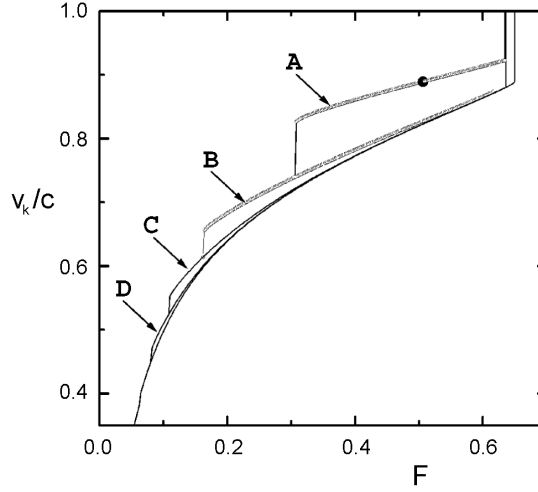


Рис. 8.18. Зависимость скорости v_k кратного 4π -кинка от силы F для damped driven модели ФК с гармоническим взаимодействием между атомами ($g = 1$, $\eta = 0.1$, и $N = 100$). Стрелки соответствуют различным связанным состояниям: (A) чистый 4π -кинк (без разделения между составляющими 2π -кинками); (B) первое связанное состояние (одна осцилляция между двумя 2π -кинками); (C) второе связанное состояние (две осцилляции между 2π -кинками); и (D) третье связанное состояние (три осцилляции между 2π -кинками) [716].

где $g = V''(a_s) = V_0\beta^2 \exp(-\beta a_s)$ – постоянная упругости,

$$\alpha = -(a_s/d) [V'''(a_s)/V''(a_s)] = \beta/\sqrt{g}$$

– параметр ангармонизма, а $h^2 = a_s^2/12 = \pi^2/3$ – параметр дискретности. Решение бегущей волны $u_k(x - vt) \equiv u_k(z)$, должно удовлетворять уравнению

$$\begin{aligned} h^2 v^2 u_k'''' + (c^2 - v^2 - h^2 \cos u_k) u_k'' + h^2 (u_k')^2 \sin u_k \\ - \alpha d^3 u_k'' u_k' + \eta v u_k' - \sin u_k + F = 0, \end{aligned} \quad (8.57)$$

где $c = 2\pi\sqrt{g}$ – скорость звука (напомним, что $c = d$). Кинковое решение соответствует сепаратрисе уравнения (8.57). Используя безразмерные переменные $\tilde{z} = z/d$, $\tilde{v} = v/c$, $\tilde{h} = h/d = (12g)^{-1/2}$, и вводя новые переменные $\xi = u_k(\tilde{z})$ и $w(\xi) = u_k'(\tilde{z})$, уравнение (8.57) может быть переписано как

$$\begin{aligned} & \left\{ \tilde{h}^2 \tilde{v}^2 \left[w'''(\xi) w^2(\xi) + 4w''(\xi) w'(\xi) w(\xi) + [w'(\xi)]^3 \right] \right. \\ & - \alpha w'(\xi) w(\xi) + \left(1 - \tilde{v}^2 - \tilde{h}^2 \cos \xi \right) w'(\xi) \\ & \left. + \left(\tilde{h}^2 \sin \xi \right) w(\xi) + \eta \tilde{v} \right\} w(\xi) - \sin \xi + F = 0. \end{aligned} \quad (8.58)$$

Кинковое (кратное) решение должно удовлетворять граничным условиям $u_k(-\infty) = u_F + 2\pi p$, $u_k(+\infty) = u_F$, $u_k'(\pm\infty) = 0$, или $w(u_F + 2\pi p) = w(u_F) = 0$, где p – топологический заряд кинка ($p = 1$ для одиночного кинка, $p = 2$ для двойного кинка и т.д.).

Вблизи хвоста кинка, $z \rightarrow \pm\infty$, например для $\xi = u_F + 2\pi n + \epsilon$, где $|\epsilon| \ll 1$, мы можем использовать разложение

$$w(\xi) = a_1 \epsilon + \frac{1}{2} a_2 \epsilon^2 + \frac{1}{6} a_3 \epsilon^3 + \dots, \quad (8.59)$$

где $a_1 \equiv w'(u_F)$, $a_2 \equiv w''(u_F)$, и так далее. Подставляя это разложение в уравнение (8.58) и группируя вместе члены той же степени ϵ , мы получим следующее уравнение для a_1 ,

$$\tilde{h}^2 \tilde{v}^2 a_1^4 + (1 - \tilde{v}^2 - \tilde{h}^2 \cos u_F) a_1^2 + \eta \tilde{v} a_1 - \cos u_F = 0, \quad (8.60)$$

которое всегда имеет два корня, один положительный и один отрицательный, для *любой* скорости кинка v . Затем, приравнявая члены для высших степеней ϵ , мы получим выражения, которые единственным образом определяют коэффициенты a_2 , a_3 , и так далее. Таким образом, сепаратрисное решение уравнения (8.58) является *единственным*, то есть, для данного набора параметров системы *модель имеет либо одно-кинковое решение либо двухкинковое решение*, но никогда оба решения одновременно.

Легко показать, что в случае $F = \eta = h = 0$, континуальное уравнение (8.57) соответствует некоторому экстремуму следующего энергетического функционала [264],

$$E[u(z)] = \int dz \left[\frac{1}{2}(c^2 - v^2)(u')^2 - \frac{1}{6}\alpha d^3(u')^3 - \cos u \right]. \quad (8.61)$$

Подставляя простой анзац СГ-типа $u_{\text{SG}}(z) = 4 \tan^{-1} \exp(-z/d_{\text{eff}})$ в уравнение (8.61), мы получим

$$E(d_{\text{eff}}) = 4 \frac{c^2 - v^2}{d_{\text{eff}}} + \frac{2\pi}{3} \alpha \frac{c^3}{d_{\text{eff}}^2} + 4d_{\text{eff}}. \quad (8.62)$$

Хотя вариационный подход не описывает строго хвосты кинка, так как пренебрегает эффектами дискретности, он позволяет нам найти аналитически форму ядра кинка и, следовательно, вычислить приближенно скорость кинка. Действительно, ища экстремум функции $E(d_{\text{eff}})$, мы приходим к уравнению $E'(d_{\text{eff}}) = 0$ или к

$$\left(\frac{d_{\text{eff}}}{d} \right)^3 = \left[1 - \left(\frac{v}{c} \right)^2 \right] \left(\frac{d_{\text{eff}}}{d} \right) + \frac{\pi}{3} \alpha, \quad (8.63)$$

Для гармонического взаимодействия, $\alpha = 0$, уравнение (8.63) имеет решение только при $|v| < c$, которое описывает релятивистское сужение СГ кинка, $d_{\text{eff}} = d [1 - (v/c)^2]^{1/2}$. Но для ангармоничного взаимодействия, $\alpha > 0$, уравнение (8.63) имеет решение для *любой* скорости кинка v , включая сверхзвуковые скорости $|v| > c$. Мы подчеркнем, что *сверхзвуковые возбуждения возможны только для кинков (локальных сжатий)*.

Рассматривая кинк как твердую квазичастицу, можно ввести ее эффективную массу как (см. параграф 3.1) $m_k = a_s^{-1} \int dz [u'(z)]^2 = 4/\pi d_{\text{eff}}$. Затем, предполагая, что параметры кинка при ненулевой силе F будут такими же как и в случае $F = 0$, скорость установившегося движения кинка может быть приближенно найдена из уравнения $v_k = F/m_k \eta = \pi c F d_{\text{eff}}(v_k)/4\eta d$. Таким образом, уравнение (8.63) может быть переписано в форме

$$\left[1 + \left(\frac{\pi F}{4\eta} \right)^2 \right] \left(\frac{d_{\text{eff}}}{d} \right)^3 = \frac{d_{\text{eff}}}{d} + \frac{\pi}{3} \alpha. \quad (8.64)$$

Численное решения уравнения (8.64) позволяет нам найти функцию $v_k^{(\text{var})}(F)$, которая показана пунктирной кривой на рис. 8.19 вместе с зависимостью $v_k(F)$ полученной при решении дискретного уравнения движения (8.44). Из рисунка видно, что в ангармоничной модели мы всегда имеем $v_k^{(\text{var})} > c$ при $F \rightarrow F_s = 1$, и хотя скорость полученная при моделировании меньше чем $v_k^{(\text{var})}$ из-за дополнительного торможения кинка обусловленного излучением фононов, дискретный кинк все еще может достигать сверхзвуковой скорости. Таким образом, вариационный подход предсказывает, что сверхзвуковые кинки можно ожидать только в *ангармоничной* модели ФК.

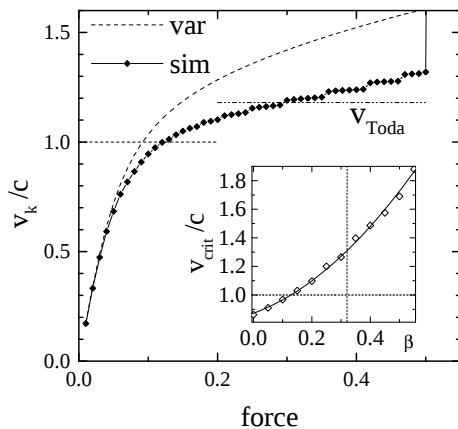


Рис. 8.19. Зависимость скорости v_k одиночного кинка от силы F для $\beta = 1/\pi$, $g = 1$ и $\eta = 0.05$. Сплошная кривая соответствует результатам моделирования, а пунктирная линия — результатам вариационного приближения. Вставка: критическая скорость кинка v_{crit} как функция параметра ангармонизма β при фиксированной силе $F = 0.5$.

Возвращаясь к *дискретной* модели, напомним что в классической модели ФК кинк под действием силы не может достигать даже скорости звука, так как он становится неустойчивым при $v_{\text{crit}} < c$ и система переходит в “бегущее” состояние (см. выше параграф 8.5). Однако, в ангармоничной модели ФК, критическое значение скорости кинка может превышать скорость звука. Зависимость v_{crit} от параметра ангармонизма β показана на вставке рисунка 8.19.

Для изучения двойного кинка с помощью вариационного подхода, давайте рассмотрим его как сумму двух одиночных кинков расположенных на расстоянии r ,

$$u_2(z) = u_{SG}(z - r/2) + u_{SG}(z + r/2). \quad (8.65)$$

Подставляя анзац (8.65) в функционал (8.61), мы получим эффективную энергию $E(d_{\text{eff}}, r)$, которая теперь будет зависеть от двух параметров d_{eff} и r . Ища минимум функции $E(d_{\text{eff}}, r)$ от переменной d_{eff} при фиксированном значении r , можно проверить что для классической модели ФК ($\alpha = 0$) $E(r) \equiv \min_{d_{\text{eff}}} E(d_{\text{eff}}, r)$ является монотонно убывающей функцией от r , то есть кинки отталкиваются друг от друга. Сдругой стороны, для ангармоничной модели ФК функция $E(r)$ имеет минимум при некотором $r = r_{\text{min}} < \infty$, таким образом два кинка притягиваются друг к другу и они могут быть связаны в двойной кинк. Энергия “диссоциации” двойного кинка очень мала при дозвуковых скоростях, но становится достаточно высокой при сверхзвуковых скоростях (см. вставку на рис. 8.20). “Размер” r_{min} двойного кинка убывает с увеличением скорости $|v|$. Таким образом, хотя вариационный подход с использование СГ-анзаца является достаточно грубым, он тем не менее предсказывает что кратный кинк должен быть устойчивым для высоких (сверхзвуковых) значений скорости кинка.

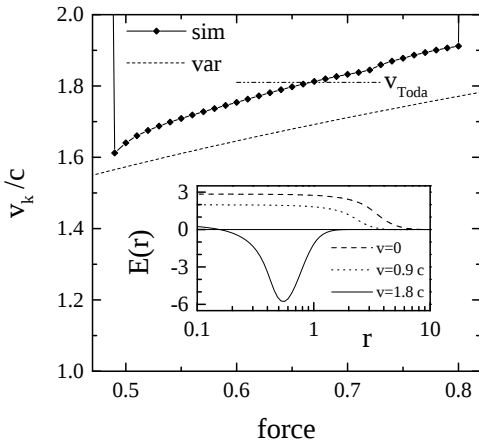


Рис. 8.20. То же самое что и на рис. 8.19, но для двойного кинка. Вставка: эффективная энергия $E(r) = \min_d E(d, r)$ двойного кинка как функция расстояния r между составляющими подкинками при фиксированных значениях скорости кинка $v_k = 0, 0.9c$, and $1.8c$.

Как хорошо известно, СГ кинки одинакового топологического заряда всегда отталкиваются друг от друга. Это также справедливо для стационарных кинков ($v = 0$) в дискретной модели ФК, включая ангармоничную ($\alpha \neq 0$) модель [319], вопреки вариационному приближению, которое ошибочно предсказывает слабое притяжение при $|v| < c$. Таким образом, должно существовать пороговое значение скорости кинка v_1 , такое что при малых скоростях $0 \leq v < v_1$ решение соответствующее установившемуся состоянию модели соответствует 2π -кинку, в то время как при высоких скоростях $v > v_1$, оно соответствует двойному (4π -) кинку (если v_1 меньше чем скорость кинка при $F = F_s$, что всегда выполняется при достаточно низких значениях η). Действительно, результаты моделирования представленные на рис. 8.20 показывают, что двойной кинк является устойчивым при силе из интервала $0.5 < F < 0.8$, но становится неустойчивым как при больших, так и при меньших значениях силы, в то время как 2π -кинк устойчив только при $F < 0.5$ (более тщательное вычисление показывает, что области существования единичного и двойного кинка слегка перекрываются, например, для параметров $g = 1$, $\beta = 1/\pi$ и $\eta = 0.05$ Браун и соавторы [719] нашли что для одиночного кинка $0 \leq F \leq 0.5067$, а для двойного кинка $0.4688 \leq F \leq 0.8767$). Аналогично можно ожидать существования второго порогового значения скорости v_2 , такой что при $v > v_2$ установившееся решение будет соответствовать 6π -кинку, и так далее.

Наконец заметим, что сверхзвуковые кинки и кратные кинки также устойчивы и при ненулевой температуре. Заметим также, что при сильной силе скорость кинка близка к скорости солитона Тоды [270]. Действительно, форма солитона Тоды характеризуется “скачком” $\Delta u = 2\mu a_s/\beta$, где μ параметр связанным со скоростью солитона соотношением $v_{\text{Toda}} = c \sinh(\mu a_s)/\mu a_s$. В присутствии внешнего потенциала подложки прыжок Δu должен быть равен pa_s для p -кинка; поэтому мы получаем $\mu = p\beta/2$. В частности, для ангармоничного параметра $\beta = 1/\pi$ мы имеем $v_{\text{Toda}}/c = (\sinh p)/p \approx 1.18$ для 2π -кинка и $v_{\text{Toda}}/c \approx 1.81$ для 4π -кинка, соответственно. Таким образом, сверхзвуковые и кратные кинки могут быть рассмотрены как солитоны Тоды “возмущенные” внешнем периодическим потенциалом.

8.7 Переход из закрепленного в скользящее состояние

8.7.1 Соразмерные основные состояния

Если $T = 0$ и основное состояние является тривиальным (то есть, $\theta = 1$ или $\theta = 1/q$ с целым q), тогда переход из закрепленного состояния в скользящее происходит только при $F = F_s$. Однако, если $T > 0$, тогда переход происходит при более низкой пороговой силе, $F_f \approx F_{\text{crit}} < F_s$. Детальное поведение системы при переходе ясно видно из рис. 8.21, где траектории атомов показаны только в точке перехода [190]. Как можно видеть, сценарий перехода начинается с рождения кинк-антикиновой пары. Кинк и антикинк двигаются в противоположных направлениях, квазиупруго сталкиваются (из-за периодических граничных условий), и достаточно быстро в хвосте первичного кинка рождается новая кинк-антикиновая пара и затем другая пара в хвосте нового кинка. Этот процесс далее приводит к лавино-образному росту концентрации кинк-антикиновых пар и заканчивается на полностью двигающемся состоянии цепи.

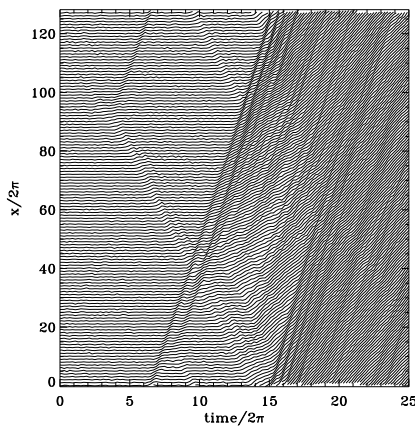


Рис. 8.21. Траектории атомов для соразмерной ФК модели с экспоненциальным взаимодействием при $F = 0.53$ и $T = 0.7$ ($\theta = 1$, $g_{\text{eff}} = 1$, $\eta = 0.1$, $\beta = 1/2\pi$, $N = 128$).

Таким образом, в конечной системе при малой T , когда структура является *соразмерной* и отсутствуют кинки в ОС, первым событием является термически возбужденное и стимулированное силой рождение кинк-антикиновой пары. С другой стороны, в бесконечной системе всегда имеется ненулевая концентрация кинк-антикиновых пар. Дальнейший сценарий будет таким же как для одиночного быстрого кинка, за исключением того, что теперь переход начинается немного раньше, так как мы не должны ждать до появления первой кинк-антикиновой пары в хвосте быстрого кинка.

8.7.2 Сложные основные состояния и многошаговый переход

Безразмерная концентрация атомов $\theta = N/M$ (отношение числа частиц N к числу имеющихся ячеек M) в системе ФК играет ключевую роль так как она определяет число геометрических кинков. Эти возбуждения могут быть определены для любой фоновой *соразмерной* структуры атомов $\theta_0 = p/q$, где целые числа p и q не имеют общих делителей. Если концентрация θ слегка отличается от величины фона θ_0 , то основное состояние системы соответствует большим областям с соизмеримыми покрытиями подложки θ_0 , разделенными локальными несоразмерными зонами сжатия (растяжения) называемыми кинками (антикинками).

Когда внешняя сила возрастает, система ФК с нетривиальным ОС демонстрирует иерархию динамических фазовых переходов первого порядка из полностью неподвижного состояния в полностью двигающееся состояние, проходя через несколько промежуточных стадий, которые характеризуются двигающимся состоянием коллективных квазичастичных возбуждений, или кинков модели ФК. Как пример, давайте вначале рассмотрим случай $\theta = 21/41$, когда транспорт массы вдоль цепи осуществляется тривиальными кинками сконструированных на фоне структуры с $\theta_0 = 1/2$. Так как среднее расстояние между кинками является большим (равным $41a_s$ в основном состоянии), то кинк-кинковое взаимодействие мало, и поток атомов ограничивается только необходимостью преодоления кинками ПН барьеров [см. рис. 8.22(a)]. Когда движущаяся сила F возрастает, ПН барьеры уменьшаются, что приводит к возрастанию подвижности одиночных кинков. Таким образом, при нулевой температуре переход из связанного состояния с $B = 0$ в состояние двигающихся кинков происходит при силе $F \approx F_{tk} = C\pi\varepsilon_{PN}/a_s$, где множитель $C \approx 1$ зависит от формы ПН потенциала. Подвижность состояния двигающихся кинков $B \approx \theta_k B_f$, где $\theta_k = 1/41$ – безразмерная концентрация кинков.

Дальнейший сценарий зависит от величины коэффициента трения η . При очень низком трении, $\eta < 0.05\omega_0$, промежуточные стадии отсутствуют, так как двигающиеся кинки разрушаются сами по себе как только они

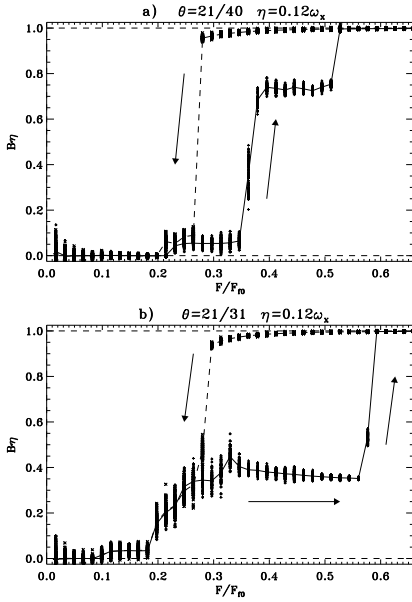


Рис. 8.22. Зависимость подвижности $B = \langle v \rangle / F$ от силы F для underdamped ($\eta = 0.12$) модели ФК с экспоненциальным взаимодействием ($g_{\text{eff}} = 0.58$) (a) при $\theta = 21/40$ (тривиальные кинки на фоне тривиальной $\theta_0 = 1/2$ структуры) и при (b) для $\theta = 21/31$ (суперкинки на фоне сложной $\theta_0 = 2/3$ структуры).

начинают двигаться: они немедленно вызывают обвал переводящий систему в состояние со всеми двигающимися атомами. Таким образом, когда сила возрастает, система скачком переходит из закрепленного состояния прямо в бегущее состояние при силе F_{tk} .

При сильном трении $\eta > 0.05 \omega_0$, уже существуют упоминаемые выше промежуточные стадии с двигающимися кинками. Механизм второго резкого возрастания подвижности также зависит от η . При слабом трении критическое значение силы F_f зависит от трения: $F_f \approx m_k \eta v_{\text{crit}}$. Переход в двигающееся состояние происходит из-за неустойчивости быстрых кинков при их достижении критической скорости. При сильном трении переход происходит когда сила превосходит некоторый порог связанный с исчезновением энергетического барьера для рождения дополнительных кинк-антикинковых пар в системе подобно описанному выше сверхвязкому случаю (см. рис. 8.7(a)). Внешняя сила уменьшает энергию седловой точки для рождения кинк-антикинковой пары определяемую уравнением (8.36), увеличивая тем самым скорость рождения кинк-антикинковых пар. Следовательно, в системе возрастает число переносчиков массы, приводя тем самым к увеличению подвижности. Переход от порогового значения зависящего от трения к значению независящему от трения был изучен Палий с соавторами [721] и Брауном с соавторами [720].

Между стадией движущихся кинков и состоянием всеобщего движения могут существовать специфические режимы “ограниченного трафика”, которые будут рассмотрены ниже в параграфе 8.9.

Эта качественная картина справедлива также для более сложных атомных перекрытий, таких как $\theta = 21/31$ [721] (см. рис. 8.22(b) для $N = 105$ и $M = 155$). В этом случае состоянию двигающихся тривиальных кинков предшествует состояние двигающихся суперкинков. Основное состояние здесь соответствует областям сложной $\theta_0 = 2/3$ соразмерной структуры, разделенными *суперкинками* со средним шагом между ними $30 a_s$. С другой стороны, структуры с $\theta = 2/3$ могут быть рассмотрены как плотная решетка *тривиальных* кинков определенных на фоне структуры с $\theta_0 = 1/2$. Эта специфика ясно проявляется в зависимости $B(F)$. В процессе увеличения силы теперь присутствует два резких шага возрастания подвижности B . Первый шаг при $F = F_{sk} \approx 0.08 F_s$, соответствует ситуации когда суперкинки начинают скользить, в то время как второй шаг при $F = F'_{tk} \approx 0.18 F_s$, соответствует переходу тривиальных кинков в двигающиеся состояния. Критическое значение силы для суперкинка F_{sk} не зависит от трения, в то время как критическое значение силы для тривиального кинка F'_{tk} увеличивается с ростом трения η и при сильном трении достигает постоянного значения $F'_{tk} \approx 0.24 F_s$, которое почти точно соответствует значению $F_{tk} \approx 0.23 F_s$ для случая покрытия $\theta = 21/40$. Действительно, так как двигающие суперкинки возбуждают фононы, это может быть проинтерпретировано как эффективное возрастание температуры системы, а вторая ступенька в зависимости $B(F)$ должна иметь место либо при $F \approx F_{PN}^{(tk)}$, либо при $F \approx C'' \left[(\eta + \eta_{sk}) / \omega_{PN}^{(tk)} \right] F_{PN}^{(tk)}$ если это значение меньше, где мы должны взять пороговое значение силы для тривиального кинка F_{tk} и пороговое значение обусловленное ПН потенциалом $F_{PN}^{(tk)}$.

Подвижность при промежуточном установившемся состоянии скользящих суперкинков может быть грубо оценена как $B \approx \theta_{sk} B_{sk}$, где θ_{sk} – безразмерная концентрация суперкинков, $B_{sk} \approx (m_{sk} \eta_{sk})^{-1}$ – подвижность одного суперкинка, m_{sk} – его масса, а трение $\eta_{sk} = \eta + \eta_{\text{int}}$ состоит из внешнего торможения η и внутреннего трения η_{int} , которое обусловлено, как было показано в параграфе 7.2.2, возбуждением фононов. Однако, вычисление подвижности суперкинка B_{sk} является тоже сложной задачей. Хенчель и др. [722] предложили

альтернативный подход, в котором решение уравнения (8.44) ищется в приближенной форме,

$$x_l(t) = X(t) + \psi_l(t), \quad (8.66)$$

то есть динамика разделяется на вклад от центра масс (с.м.) $X(t)$ и пространственно-временные флуктуации $\psi_l(t)$, со средним $\langle \psi_l(t) \rangle_x = 0$ по определению (здесь и далее $\langle \dots \rangle_x$ обозначает пространственное среднее, а $\langle \dots \rangle_t$ – временное среднее). Пренебрегая высокими гармониками частоты биения $\omega_{\text{wash}} = (2\pi/a_s)V$, где $V = \langle \dot{X}(t) \rangle_t$ – средняя скорость установившегося движения, координату центра масс может быть приближенно взята в форме

$$X(t) \approx Vt + B \sin(\omega_{\text{wash}} t). \quad (8.67)$$

Флуктуационный вклад описывается приближенно квази-линейным уравнением

$$\ddot{\psi}_q + \eta \dot{\psi}_q + (\omega_q^2 + C \cos X_q) \psi_q = 0, \quad (8.68)$$

где $\omega_q = 2\sqrt{g} \sin(qa_A/2)$ – фононный спектр упругой цепи без потенциала подложки, постоянная $C \approx (1 + 2\langle \psi_l^2 \rangle_{x,t})^{-1/2}$. При получении уравнения было применено пространственное преобразование Фурье $[\psi_q = N^{-1} \sum_l \psi_l \exp(-iqla_A)]$, $q = (j - N/2)\Delta q$, $\Delta q = 2\pi/Na_A$, а целое $j = 1, \dots, N$, так что $|q| < \pi/a_A$. Затем, осцилляции $X(t)$, уравнение (8.67), приводят в наименьшем приближении к возбуждению, в силу параметрического резонанса в уравнении (8.68), только одной фононной моды с частотой $\omega \sim \frac{1}{2}\omega_{\text{wash}}$ и амплитудой b (см., также, параграф 5.2.2). Амплитуды B и b могут быть найдены при подстановки уравнения (8.67) в уравнение (8.68) и затем само-согласованного решения получившегося уравнения. Наконец, приравнивая среднюю энергию входящую в цепочку (на одну единицу времени) $E_{\text{input}} = FV$, к средней диссипации энергии в силу движения центра масс ηV^2 , его временных флуктуаций $\eta \left\langle \left(\dot{X}(t) - V \right)^2 \right\rangle_t$ и пространственных флуктуаций $\eta \langle \psi_l^2 \rangle_{x,t}$, можно найти скорость V и затем подвижность системы как $B \approx B_f / (1 + \frac{1}{2}B^2 + \frac{1}{8}b^2)$.

Режим кинк-антикиновой нуклеации для классической модели ФК при $T = 0$ был детально изучен Струнцем и Элмером [712]. Они назвали этот режим “жидко-скользящим” состоянием (ЖСС), в то время как состояние полного движения было названо “твёрдо-скользящим” состоянием (ТСС). Вычисляя корреляционные функции скорости и спектр Ляпунова, Струнц и Элмер [712] показали, что ЖСС является пространственно-временным хаотическим состоянием. Хотя функция распределения скорости в ЖСС может быть хорошо приближена гауссовской кривой (распределением Максвелла), но ЖСС находится далеко от состояния теплового равновесия, так как здесь нарушена теорема равного распределения: средняя энергия фононной моды зависит от его волнового вектора. Переход из кинк-доминирующего режима в ЖСС (неравновесное “плавление”) подобен фазовому переходу первого рода. Интересно, что зависимость порогового значения силы для этого перехода от коэффициента трения η близка к $F_2(\eta)$ зависимости (8.13) одно-атомной системы в пределе $T \rightarrow 0$. Обратный переход из ЖСС в закреплённое состояние (неравновесное “замораживание”) активационным процессом и окончательное “замороженное” состояние часто содержит области разными (двумя) плотностями атомов.

Если система имеет ненулевую температуру, тогда все переходы будут смазанными, а первая ступенька в зависимости $B(F)$, обусловленная переходом от флуктуирующего (термически активированного) (супер-) кинкового движения к состоянию скользящего движения кинков, из-за тепловых колебаний должна быть несколько раньше при значении $F \approx C''(\eta/\omega_{PN})F_{PN}$ вместо ПН значения силы при $T = 0$.

Наконец рис. 8.23 (см. также рис. 5.9) показывает зависимость $B(F)$ при концентрации $\theta = 144/233 \approx 0.618$, которая близка к несоразмерной концентрации $\theta_{gm} = (\sqrt{5} - 1)/2$ (“наиболее иррациональное число”, см., например Харди и Райт [723]). Напомним, что для несоразмерной концентрации, основное состояние системы при $T = 0$ может соответствовать двум различным состояниям в зависимости от величины постоянной упругости g . Для малого g , $g < g_{\text{Aubry}}$ (где $g_{\text{Aubry}} \approx 1.0291926$ для $\theta = \theta_{gm}$) ОС является пинингованным, в то время как при $g > g_{\text{Aubry}}$ ОС будет скользящим, т.е. без активационного барьера движения. В случае пинингованного ОС, $g < g_{\text{Aubry}}$, подвижность будет нулевой при малых силах. Когда F возрастает, система достигает точки Обри вследствие понижения барьеров наклонного потенциала подложки, и при силе $F = F_{PN}$ система будет обладать уже ненулевой подвижностью. Когда внешняя сила F дальше возрастает, скорость демонстрирует медленный рост, который должен состоять из бесконечного счетного множества шагов как в дьявольской лестнице, но описать в деталях это поведение очень сложно. С другой стороны, выше перехода Обри, $g > g_{\text{Aubry}}$, подвижность B будет ненулевой и близкой по значению к максимальной величина B_f при $F \rightarrow 0$. В этом случае с возрастанием силы подвижность уменьшается, а скорость центра масс как функция силы F снова имеет несколько скачков. В обоих случаях скачки обусловлены эффектами запираания скорости и параметрическими резонансами приводящими к излучению фонов, коротко описанными в параграфе 5.2.2. При $T = 0$ динамика системы при малых силах может быть описана, по крайней мере с точностью численного моделирования, однозначно определенной динамической корпусной функцией, в то время как переходы между ступеньками, – неустойчивостью соответствующих состояний с фиксированной скоростью [712]. Затем, при высоких силах,

поведение подобное дьявольской лестнице разрушается и, после промежуточного состояния соответствующего режиму нуклеации кинк-антикиновых пар (пространственно-временному хаотическому состоянию), система совершает резкий переход в полностью движущееся состояние, так что подвижность резко возрастает до максимального значения $B \approx B_f$.

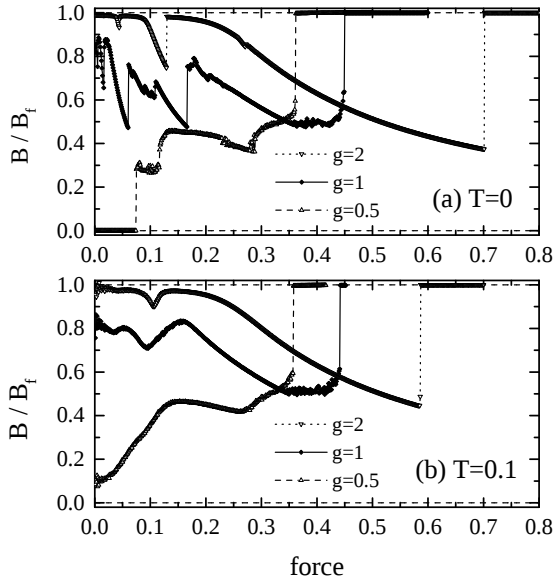


Рис. 8.23. Зависимость подвижности B от (адиабатически медленно возрастающей) движущей силы F для (а) нулевой и (б) ненулевой температуры при концентрации равной “золотому среднему” ($N = 144$, $M = 233$) и $g = 0.5$ (пунктирная), 1.0 (сплошная), и 2.0 (точечная кривая).

Для ненулевой температуры зависимость $B(F)$ сглажена [см. рис. 8.23(b)]. Когда ОС пининговано, $g < g_{\text{Aubry}}$, система демонстрирует гистерезис, очень похожий на гистерезис для случая $\theta = 2/3$ на рис. 8.22(b).

8.8 Гистерезис

Таким образом, модель ФК с соразмерным ОС или с несоразмерным ОС, но с $g < g_{\text{Aubry}}$, когда при $F = 0$ основное состояние является пинингованным, демонстрирует гистерезис когда приложена внешняя постоянная сила. Для нетривиального ОС, $\theta \neq 1/q$, множественные скачки в течение процесса увеличения силы могут быть объяснены иерархией депининга: сначала, геометрических кинков, затем “силой возбуждения” кинков и наконец депинингом атомов. В течении процесса увеличения силы система проходит через несколько промежуточных фаз. Ариясу и Бишоп [724] изучили переход *из скольжения в закрепление* для модели СГ с малым трением. Авторы показали, что система проходит вначале через серию состояний “мод с полостями” и затем через серию состояний с последовательностью кинк-антикиновых волн (в бесконечной системе эта последовательность должна быть бесконечной, так что переход является непрерывным). Подобный сценарий наблюдается в дискретной цепи ФК [190]. Для примера, зависимости $B(F)$ показанные на рис. 8.24, позволяют точно выделить несколько шагов; каждый шаг характеризуется приблизительно постоянной скоростью (заметим, что дискретная система отличается от непрерывной системы СГ в том, что первая может иметь резонансы с фононами и это может приводить к закреплению нескольких состояний).

Хотя при ненулевой температуре, $T > 0$, в одномерной системе не должно быть гистерезиса, но моделирование показывает что гистерезис существует. Ширина петли гистерезиса уменьшается с температурой, переднее и заднее пороговые значения силы изменяются с температурой T как $F_f(0) - F_f(T) \propto \sqrt{T}$ и $F_b(T) - F_b(0) \propto \sqrt{T}$ [190], но тепловые флуктуации не приводят к исчезновению гистерезиса. Ширина петли гистерезиса, однако, зависит от скорости изменения силы как это обычно имеет место при фазовых переходах первого рода. На рис. 8.25 показаны типичные гистерезисные зависимости $B(F)$ для гармонического и экспоненциального взаимодействия. Четыре кривые на рис. 8.25 были вычислены для четырех скоростей изменения силы F , которые в десять раз отличаются одна от другой. Как видно, ширина петли убывает с уменьшением скорости R , но хорошо определяемый гистерезис продолжает существовать даже для наименьшей скорости $R = 5.3 \cdot 10^{-7}$. Таким образом, моделирование показывает что гистерезис существует для любой ненулевой скорости изменения силы.

Для аналитического объяснения гистерезиса, Браун и др. [717] изучили упрощенную модель основанную на подходе Фоккера-Планка к модели ФК. Используя приближение среднего поля авторы показали, что в системе взаимодействующих атомов гистерезисная петля должна быть намного большей и должна выживать

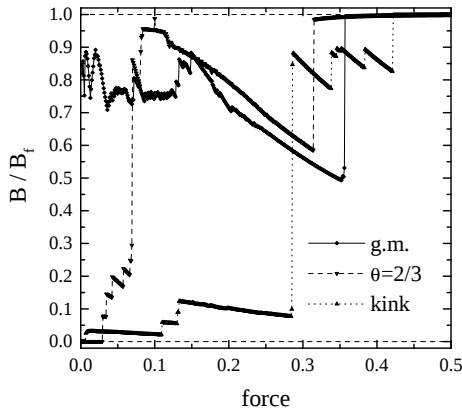


Рис. 8.24. Зависимость подвижности B от F для обратного перехода из скользящего в закрепленное состояние (когда F убывает с адиабатически медленной скоростью) для классической модели ФК с $g = 1$ при $T = 0$ для различных концентраций: один антикинк ($N = 144$, $M = 145$, точечная кривая), $\theta = 2/3$ ($N = 144$, $M = 216$, серая), и при концентрации “золотого сечения” ($N = 144$, $M = 233$, сплошная).

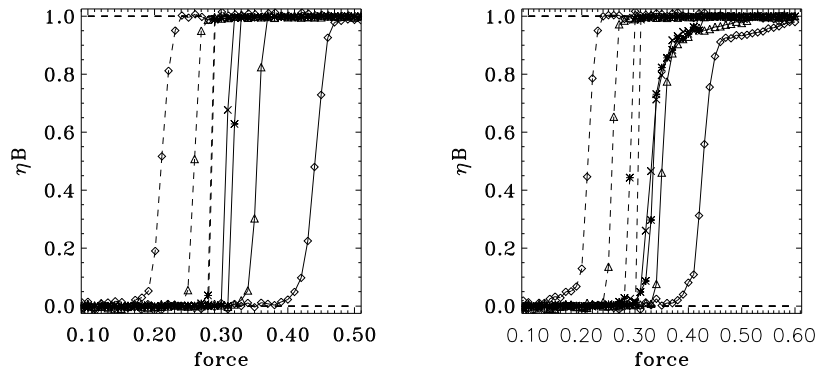


Рис. 8.25. Слева: Гистерезис $B(F)/B_f$ для стандартной модели ФК. Сплошная кривая соответствует процессу с возрастающей силой, а пунктирные – процессу с убывающей силой. Представлены четыре кривые для четырех значений скорости изменения силы $R = \Delta F/3i_R\tau_0$, где $\Delta F = 0.01$, $\tau_0 = 2\pi$ – характерный период системы, а i_R обозначены различными маркерами: ромбами для $i_R = 1$, треугольниками для $i_R = 10$, звездочками для $i_R = 10^2$ и крестиками для $i_R = 10^3$. Значения параметров $\theta = 2/3$, $N = 256$, $g = 0.1$, $T = 0.1$, и $\eta = 0.1$. Справа: То же самое как на рис. 8.25, но для экспоненциального взаимодействия (8.55) с $\beta = 1/\pi$.

при более высоких температурах чем для одного броуновского атома. Действительно, из-за связанного движения атомов в модели ФК, её атомы не могут демонстрировать бистабильность, система должна быть в целом преобразована от одного установившегося состояния в другое. Подход Фоккера-Планка показывает, что когда цепочка находится в низко-мобильном состоянии, это состояние является более устойчивым (по сравнению с системой невзаимодействующих атомов) из-за эффективного уменьшения температуры $T_{\text{eff}} < T$; локальные флуктуации с высоко-скоростными атомами являются подавленными из-за межатомного взаимодействия. Переход в движущее состояние начинается только тогда когда сила F достигает критического порогового значения F_f , а движение топологических возбуждений (кинков) становится неустойчивым. С другой стороны, если система находится в движущемся состоянии, а сила затем уменьшена, двигающиеся состояние остается устойчивым, так как локальные флуктуации с высоко-скоростными атомами (пробки) снова оказываются подавленными из-за межатомного взаимодействия. В бегущем состоянии эффективная движущая сила F_{eff} является большей чем F , и переход в связанное состояние может начаться только тогда когда впервые возникает пробка критического размера (которая может быть мезоскопически большой при сильном межатомном взаимодействии).

8.9 Транспортные пробки

Сравнивая кривые гистерезиса левой части рис. 8.25 для стандартной модели ФК с кривыми правой части рис. 8.25 вычисленными для ангармоничного (экспоненциального) взаимодействия, можно заметить следующую существенную разность между ними. Для гармонического взаимодействия, система переходит прямо из низко-мобильного (“закрепленного”) состояния в высоко-мобильное (“движущее”) состояние. Хотя система может быть найдена в установившихся состояниях с промежуточными значениями B , например с $B/B_f \sim 0.5$, эти состояния всегда соответствуют *однородному* состоянию на пространственной шкале большей чем постоянная решетки a_s . С другой стороны, для ангармоничного взаимодействия между атомами, система проходит через

промежуточные состояния, которые являются *пространственно неоднородными*. В установившихся состояниях этого типа, система разделяется на два качественно различных участка, которые отличаются концентрацией и скоростями атомов. Типичная картина траекторий атомов приведена на рис. 8.26. Здесь можно четко различить области “движения”, где атомы движутся с почти максимальными скоростями, и области “транспортных пробок”, где атомы остаются почти неподвижными. В правой части рис. 8.26, которая показывает малую часть выделенную из левой панели рис. 8.26, можно видеть динамику одиночной пробки. Пробка растет от своей левой стороны из-за входящих атомов, которые останавливаются после столкновения с пробкой и затем присоединяются к ней. От правой стороны, пробка сокращается, переводя свои атомы в правую часть области движения. Плотность распределения вероятности скорости имеет двухгорбный профиль, первый горб соответствует стационарному, а второй – движущимся атомам: это является *режимом сосуществования*. Кроме того, на правой панели рис. 8.26 можно в деталях рассмотреть сценарий динамики пробок: когда входящий атом сталкивается с пробкой, он создает кинк (локальное сжатие) в пробке. Этот кинк затем движется в правую сторону пробки и вызывает переход правого конечного атома пробки в область движения. Детальное изучение [717] показывает, что состояние с пробкой движения соответствует странному аттрактору системы и поэтому является устойчивым установившимся состоянием. Более того, состояние с пробкой движения остается устойчивым при ненулевых температурах, по крайней мере для достаточно малых T .

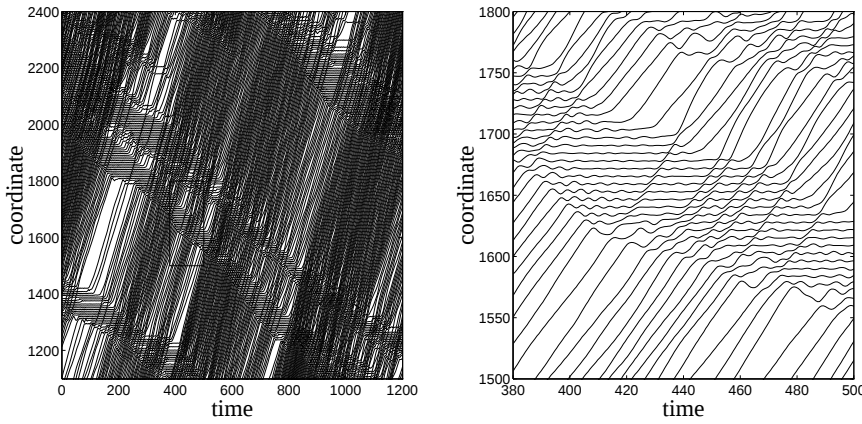


Рис. 8.26. Траектории атомов для цепи с экспоненциальным взаимодействием с $\beta = 1/\pi$ при фиксированном значении силы $F = 0.33$. Остальные параметры такие же как на рис. 8.25. Прямоугольник на левой панели показан с увеличением на правой панели. Она показывает динамику единичной пробки.

Однако, так как режим с транспортными пробками не наблюдается в классической ФК модели с гармоническим межатомным взаимодействием, то нужно найти область значений параметров для которых система демонстрирует переход из однородного состояния в неоднородный режим движения с пробкой. Для изучения этого феномена, Браун и др. [717] взяли в качестве взаимодействия ближайших соседей (экспоненциальный) потенциал Тоды $V(x) = V_0 e^{-\beta x}$, который характеризуется радиусом взаимодействия $r = \beta^{-1}$, и вычислили зависимость $B(\eta)$ при фиксированном значении движущей силы F . Кроме того, они вычислили корреляционную функцию скорости

$$K_l = \langle (\dot{x}_{i+l} - \dot{x}_i)^2 \rangle, \quad (8.69)$$

которая помогает отличить однородное установившееся состояние от неоднородных состояний.

Было обнаружено, что когда параметр η убывает, система переходит из связанного состояния с низкой подвижностью (LS) в высоко-подвижное движущееся состояние (RS). Для гармонического взаимодействия, этот переход происходит в один шаг, и корреляционная функция $K_l(\eta)$ имеют пик только в точке перехода. Для экспоненциального взаимодействия, переход происходит, в противоположность предыдущему, через два шага. Сначала система переходит в промежуточное состояние имеющее плато с $0 < B < B_f$, и только затем, с дальнейшим убыванием η , в движущееся состояние с достижением в конце подвижности $B \approx B_f$. Это промежуточное состояние всегда соответствует установившемуся состоянию с пробками движения. В тоже самое время корреляционная функция $K_1(\eta)$ имеет два пика, один при переходе в неоднородное движущееся состояние с пробкой (ПС), и второй при переходе в движущееся состояние. Из определения (8.69) можно увидеть, что значение K_1 должно быть пропорциональным числу пробок в системе, так как скорости ближайших соседних атомов могут существенно отличаться друг от друга только на границах разделяющих области движения и пробок. Следовательно, факт существования двух пиков у зависимости $K_1(\eta)$ можно использовать как индикатор состояния с пробкой, в то время как положения этих пиков показывает область значений параметра при которых существует ПС режим.

Напомним, что безразмерная постоянная упругости, которая является основным параметром классической модели ФК, определяется как $g = a_s^2 V''(a_A)/2\pi^2 \varepsilon_s$, так что для потенциала (8.55) она равна $g = V_0 \beta^2 \exp(-\beta a_A)$.

Делая серию скачков для различных значений параметра β и сохраняя в то же самое время значение постоянной упругости g фиксированным, так что бы предел $\beta \rightarrow 0$ соответствовал гармоническому взаимодействию (стандартная модель ФК), а предел $\beta \rightarrow \infty$ описывал газ твердых частиц, мы можем построить фазовую диаграмму на плоскости (η, β) , извлекая положение максимума функции $K_1(\eta)$ для каждого значения параметра β . Фазовая диаграмма дана на рис. 8.27.

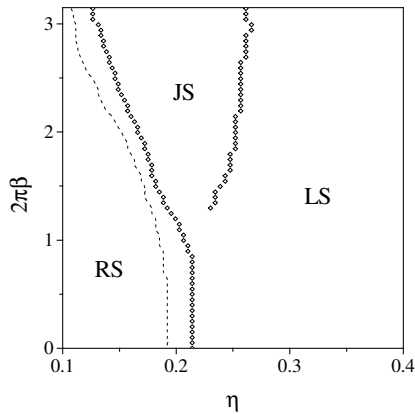


Рис. 8.27. Фазовая диаграмма для плоскости (η, β) при фиксированном значении g , где $N = 256$, $g = 0.1$, $F = 0.5$, и $T = 0.1$; LS – связанное состояние, JS – установившееся состояние с пробками, и RS – бегущее состояние. Ромбы соответствуют максимуму $K_1(\eta)$, а пунктирная кривая соответствует $B(\eta) = 0.9 B_f$.

Результаты моделирования показывают, что переход в устойчивое состояние с пробками возникает для экспоненциального взаимодействия (8.55) только при $\beta > a_s^{-1}$. Таким образом, *переход в состояние с пробками происходит только для короткодействующего межатомного взаимодействия*, когда радиусы взаимодействия меньше периода внешнего периодического потенциала, и только для малых коэффициентов трения, со значениями из интервала предшествующем переходу в движущееся состояние. В этом контексте Браун с соавторами [717, 725] предложили обобщенную решеточно-газовую модель с двумя состояниями атомов. Эта модель движения с пробками характеризуется нелинейной зависимостью подвижности от вероятности пробки, обладает гистерезисом, и описывает организацию неподвижных атомов в компактные области (пробки). Кроме того, была развита теория среднего поля для модели LG, описывающая *кинетику* пробок движения.

Окончательно, *пробки движения* возникают в нагруженной 1D системе, если выполнены следующие условия: (i) должен присутствовать (подложечный) потенциал; (ii) движение должно быть слабо демпфированным, частицы должны иметь два различных состояния, связанное состояние и движущиеся состояние. В модели ФК бистабильность существует в силу инерции атомов.

Эти два условия уже являются достаточными для *существования* состояния движения с пробками. Действительно, если руками приготовить начальную конфигурацию с пробкой и затем резко приложить движущую силу, это состояние может сохраниться в классической модели ФК даже при ненулевой температуре. Струнц и Элмер [712] изучили установившиеся скользящие состояния характеризующиеся областями с различными плотностями атомов (которые могут быть рассмотрены как обобщения рассмотренного выше ПС состояния) в классической модели ФК при $T = 0$. Однако, *переход* из однородного состояния в состояние движения с пробкой при медленном изменении параметров модели происходит только если еще выполнены два условия:

(i) В системе должна присутствовать некоторая случайность. Внутреннего хаоса, который всегда существует из-за неинтегрируемости дискретной модели ФК, уже достаточно для существования движения с пробками (хотя в случае $T = 0$ мы должны начать с введения хаоса в систему через использование ланжевеновских уравнений движения с $T > 0$; в этом случае состояние движения с пробкой возникает при любом начальном состоянии. Конечно, температура не должна быть слишком большой, тепловая энергия должна быть меньше чем энергия межатомного взаимодействия (иначе поведение будет таким же как для системы невзаимодействующих атомов), так же как она должна быть меньше ε_s (иначе поведение будет таким же как для системы без внешнего потенциала);

(ii) Межчастичное взаимодействие должно быть ангармоничным. Потенциала с жестким ядром, когда атомы практически не взаимодействуют, они только не могут занимать те же самые ямы потенциалы подложки, уже достаточно для получения поведения движения с пробками. Таким образом, для гармонического межатомного взаимодействия следует ожидать отсутствие перехода в состояние движения с пробками. Однако, здесь ситуация более тонкая: в стандартной модели ФК для *атомов* отсутствует переход в состояние движения с пробками, но *кинки* еще могут быть организованы в пробки, так как при учете только взаимодействия ближних соседних атомов, взаимодействие между кинками всегда является экспоненциальным.

8.10 Периодические силы: диссипативная динамика

В заключение давайте кратко рассмотрим систему ФК с внешней (пространственно однородной) периодической силой $F(t) = F(t + \tau_{\text{ext}})$, где τ_{ext} – ее период, ее частота $\Omega = 2\pi/\tau_{\text{ext}}$. Из-за сложности задачи мы вначале рассмотрим сверхвязкий случай, следуя обзору Флория и Мазо [487]. Уравнения движения,

$$\dot{x}_l = g(x_{l+1} + x_{l-1} - 2x_l) - \sin x_l + F(t), \quad (8.70)$$

имеют следующую симметрию: если $\{x_l(t)\}$ – решение уравнения (8.70), которое соответствует начальной конфигурации $\{x_l(t_0)\}$, тогда траектория

$$\sigma_{i,j,m}\{x_l(t)\} \equiv \{x_{l+i}(t - m\tau_{\text{ext}}) + ja_s\}, \quad (8.71)$$

где i, j и m произвольные целые, будет решением соответствующим начальной конфигурации $\sigma_{i,j,m}\{x_l(t_0)\}$. Траектория $\{x_l(t)\}$ является *резонансной* если имеется триплет (i, j, m) целых чисел, таких что траектория будет инвариантной относительно преобразования (8.71),

$$\{x_l(t)\} = \sigma_{i,j,m}\{x_l(t)\}. \quad (8.72)$$

Средняя скорость резонансного решения

$$\bar{v} = (\Omega/m)(iw + j)a_s/2\pi, \quad (8.73)$$

где w – параметр соразмерности (window number). Когда число w иррационально, тогда можно найти единственный *минимальный триплет*, такой что числа i, j и m не имеют общих делителей. Для рационального параметра соразмерности $w = r/s$ (r и s не имеют общих делителей), триплет будет минимальным, если числа $ir + js$ и m не имеют общих делителей (в этом случае триплет не является единственным, но целое m определяется однозначно). Тогда, резонансная скорость называется *гармонической* если $m = 1$, и *субгармонической* если $m > 1$. Главным вопросом для систем с периодической внешней силой является структурная устойчивость (то есть устойчивость относительно изменения параметров) резонансных решений (8.72).

Для проникновения в суть задачи синхронизации ФК цепи внешней периодической силой, давайте рассмотрим вначале простой случай когда сила $F(t)$ состоит из постоянной силы в течении времени t_{on} , следующим за временными интервалами t_{off} нулевого значения силы ($t_{\text{on}} + t_{\text{off}} = \tau_{\text{ext}}$),

$$F(t) = \begin{cases} F & \text{если } 0 < t < t_{\text{on}}, \\ 0 & \text{если } t_{\text{on}} < t < t_{\text{on}} + t_{\text{off}}, \end{cases} \quad (8.74)$$

и предположим что время t_{off} является достаточно большим, таким что в течение этого интервала времени цепочка успевает отрелаксировать к некоторой устойчивой стационарной конфигурации до прихода следующего импульса. В этом случае мы можем использовать полученный выше результат, что долговременное среднее значение скорости $\bar{v}$ не зависит от начальной конфигурации.

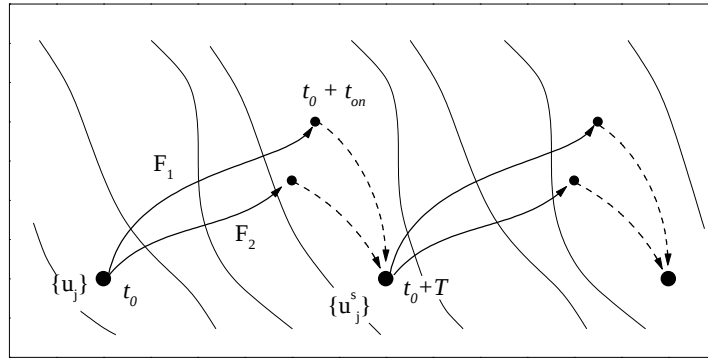


Рис. 8.28. Захват моды под действием периодически пульсирующей силы: схематический набросок s -размерного конфигурационного пространства разделенного на области притяжения связанного с каждым основным состоянием [487].

Теперь давайте начнем анализ со случая соразмерной структуры с параметр соразмерности $w = r/s$ и выберем начальные условия для конфигурации ОС с нулевой силой. Если амплитуда импульсов мала, $F < F_{PN}$, или если $F > F_{PN}$ но длительность t_{on} является не достаточно большой для того чтобы вывести

конфигурацию из области притяжения (в s -размерном конфигурационном пространстве соответствующем нулевой силе, см. рис. 8.28) начальной конфигурации ОС, конфигурация будет релаксировать при отсутствии импульса к начальной конфигурации. Таким образом, при малой F состояние с нулевой средней скоростью, $\bar{v} = 0$, будет закрепленным. Однако, если $F > F_{PN}$ и время $t_{\text{он}}$ является достаточно большим, система будет релаксировать к некоторой устойчивой конфигурации $\{x'_i\}$ в течении времени $t_{\text{оф}}$. В силу сохранения ротационного порядка при сверхвязкой динамике и единственности (с точностью до переноса на расстояние a_s и перенумеровки) конфигурации ОС, $\{x'_i\}$ должно иметь вид $\{x'_i\} = \{x_{l+i} + ja_s\}$ с целыми i и j . Следовательно, средняя скорость однозначно задается уравнением (8.73) с $m = 1$ и соответствует гармоническому резонансу. *Средняя скорость $\bar{v}$ соразмерной структуры под действием периодически пульсирующей силы (8.74) может принимать только дискретные значения (8.73) соответствующие гармоническим ($m = 1$) резонансам.*

Этот “захват динамической моды” может быть объяснен, как показано на рис. 8.28, в рамках s -размерного конфигурационного пространства. В течение импульса, система движется вдоль некоторой траектории в конфигурационном пространстве. Когда импульс отключается, система релаксирует к основному состоянию, обуславливающему область притяжения, в которой находится конечная точка траектории. Рассмотрим теперь две силы с различными амплитудами F_1 и F_2 . Если эти амплитуды так близки к друг к другу, что конечные точки обеих траекторий лежат в той же самой области притяжения, то средняя скорость должна быть той же самой, $\bar{v}(F_1) = \bar{v}(F_2)$. Таким образом, для соразмерной структуры $\bar{v}(F)$ должна быть кусочно постоянной неубывающей функцией, как показано на левой панели рис. 8.29.

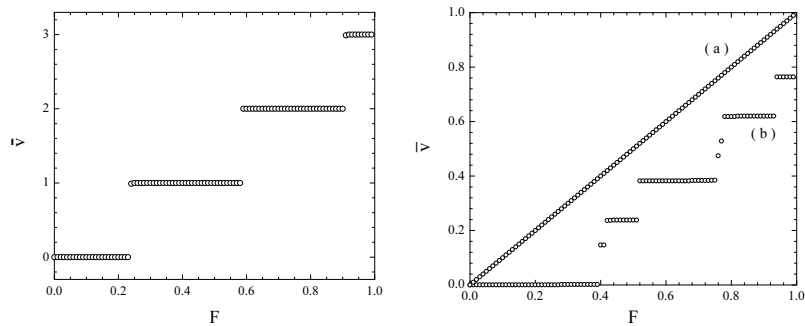


Рис. 8.29. Средняя скорость $\bar{v}$ как функция амплитуды F периодически пульсирующей силы (8.74) с $t_{\text{он}} = 1$ и $t_{\text{оф}} = 20$. Левая панель дает зависимость для соразмерной структуры с $w = 2/3$ и $g = 0.5$. Правая панель – для “несоразмерной” структуры с $w = 34/55$ и двумя значениями g : (a) $g = 10 > g_{\text{Aubry}}$ (выше перехода Обри) и (b) $g = 0.25 < g_{\text{Aubry}}$ (ниже перехода Обри) [487].

Аналогичное поведение должно наблюдаться для несоразмерной структуры ниже перехода Обри ($g < g_{\text{Aubry}}$), когда ОС является пинингованным. Это может быть понято если рассмотреть несоразмерное основное состояние как предел последовательности соразмерных основных состояний с рациональными приближениями w_n к нужному иррациональному значению параметра w . Теперь, однако, функция $\bar{v}(F)$, как показывает кривая (b) на правой панели рис. 8.29, соответствует дьявольской лестнице.

Закрепленная мода возможна только если множество основных состояний является дискретным. Если это множество непрерывно [как это имеет место для несоразмерных ОС выше перехода Обри, когда ОС может быть сдвинуто на произвольное расстояние в силу существования голдстоуновской (скользящей) моды], закрепленная динамическая мода невозможна и $\bar{v}(F)$ должна быть строго возрастающей функцией, как показывает кривая (a) на левой панели рис. 8.29.

Для синусоидальной движущей силы,

$$F(t) = \bar{F} + F_{\text{ac}} \cos(\Omega t), \quad (8.75)$$

поведение системы является более запутанным. Теперь система имеет две конкурирующие частотные шкалы: частота периодической внешней силы Ω и washboard частота $\omega_{\text{wash}} = (2\pi/a_s) \bar{v}$ движения под действием постоянной силы $\bar{F}$. В случае соразмерной структуры с *целым* параметром соразмерности w система демонстрирует только гармонические резонансы [$m = 1$ в уравнении (8.73)] аналогично описанной выше системы с движущей пульсирующей силой [726, 727]. Однако, для рациональных *нецелых* значений $w = r/s$, когда приходится $s > 1$ атомов на одну элементарную ячейку структуры ОС, моделирование показывает существование в уравнении (8.73) субгармонических резонансов с $m > 1$, как показано на левой панели рис. 8.30 [728, 729]. Более того, в последнем случае система имеет незакрепленные (нерезонансные) решения. Анализ базирующийся на теории Флоке показывает, что когда изменяется $\bar{F}$, переход закрепленного в незакрепленное состояние

соразмерной структуры происходит из-за бифуркации с седловой точкой и, таким образом, он должен быть характеризоваться критической экспонентой $\frac{1}{2}$ для средней скорости (см. детали в Ref. [487]).

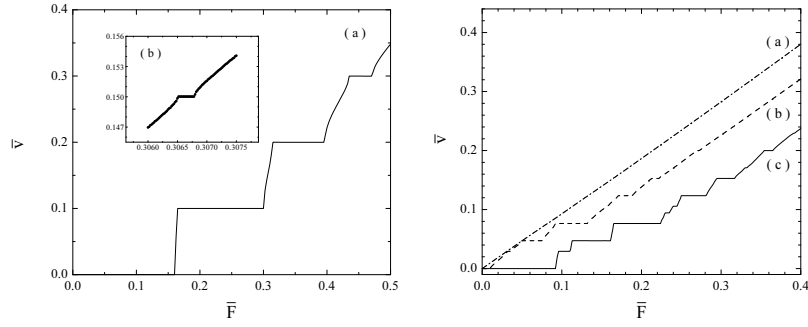


Рис. 8.30. Зависимость средней скорости $\bar{v}$ от постоянной движущей силы $\bar{F}$ под действием синусоидальной движущей силы (8.75) с $F_{ac} = 0.2$ и $\tau_{ext} = 2\pi/\Omega = 5$. Левая панель показывает зависимость для соразмерной структуры с $w = 1/2$ и $g = 0.25$. Кривая (a) показывает только гармонические ступеньки, во вставке (b) показан субгармонический шаг с $m = 2$. Правая панель – для несоизмерной структуры при трех различных значениях $K \equiv g^{-1}$: (a) $K = 1.4$ (пунктир-точечная линия), (b) $K = 2.8$ (пунктирная кривая), и (c) $K = 4.0$ (сплошная кривая) [487].

Несоизмерная структура для золотого среднего значения параметра соразмерности $w = (\sqrt{5} - 1)/2$ при действии внешней синусоидальной силы (8.75) была изучена Флория и Фало [730]. При низких значениях $K \equiv g^{-1} \ll 1$, средняя скорость $\bar{v}$ является возрастающей функцией от среднего значения внешней силы $\bar{F}$, $\bar{v} \sim \bar{F}$ [см. кривую (a) на правой панели рис. 8.30]. В этом режиме, где не наблюдаются связанные резонансные скорости, вычисленные траектории, при любом значении $\bar{v}$, могут быть выражены в терминах двух-переменной динамической корпусной функции $h(x, y)$ как

$$x_l(t) = h(lwa_s + \bar{v}t + \alpha, \Omega t + \beta), \quad (8.76)$$

где α и β произвольные фазы, а функция $\phi(x, y) = h(x, y) - x$ является по первой переменной периодической с периодом $a_s = 2\pi$, а по второй переменной периодической с периодом 2π . Динамическая корпусная функция $h(x, y)$ меняется непрерывно при изменении параметров g , $\bar{F}$, F_{ac} и Ω , и приближается к аналитическому решению $h^{(0)}(x, y) = x + (F_{ac}/\Omega) \sin y$ в пределе $K \rightarrow 0$. Таким образом, влияние малого периодического потенциала подложки на движение несоизмерных структур под действием периодической силы является только гладкой модуляцией решения в интегрируемом пределе.

Однако, при увеличении K , в зависимости $\bar{v}(\bar{F})$ начинают развиваться плоские участки (ступеньки) при резонансных скоростях (8.73) [см. кривые (b) и (c) на правой панели рис. 8.30]. Моделирование подтверждает, что для каждого резонансного значения $\bar{v}$ существует критическое значение $K_c(\bar{v})$ выше которого имеется интервал значений $\bar{F}$ для которых скорость запирается на резонансном значении. Более того, при каждом частном значении $K_c(\bar{v})$, соответствующая корпусная функция $h(x, y)$ перестает быть аналитической. Следовательно, при $K_c(\bar{v})$ мы имеем *динамическим переход Обри*. Ниже этого перехода, $g < g_c(\bar{v}) \equiv 1/K_c(\bar{v})$, где пороговое значение $g_c(\bar{v})$ зависит от параметров модели w , g и Ω , происходит запирание моды, в то время как выше перехода, $g > g_c(\bar{v})$, запирание моды отсутствует и установившееся состояние описывается аналитической двух-переменной корпусной функцией. Фазовая диаграмма для частного выбора параметров модели представлена на рис. 8.31.

Таким образом, хотя стандартный (“статический”) переход Обри является пограничной точкой между закрепленными и скользящими несоизмерными структурами, динамический переход Обри разделяет, для данного значения скорости $\bar{v}$, запертый режим, где значение $\bar{v}$ является устойчивым относительно малых изменений среднего значения внешней силы, от незапертого режима движения несоизмерной структуры при скорости $\bar{v}$. С этой точки зрения, движение несоизмерных структур под действием, описанной выше периодически пульсирующей силы (8.74), может быть рассмотрено как предельный случай синусоидальной силы (8.75), в котором динамический переход Обри происходит при единственном значении параметра g для всех резонансов, и совпадает со стандартным переходом Обри, $g_c(\bar{v}) = g_{Aubry}$.

8.11 Действие периодической силы на систему со слабым трением

Наконец, давайте кратко опишем результаты известные для динамики модели ФК со слабым трением по действием периодической внешней силы. В случае *аддитивной* осциллирующей силы с амплитудой A и частотой

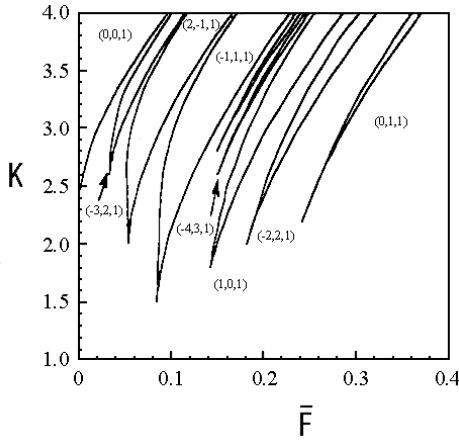


Рис. 8.31. Фазовая диаграмма различных состояний в плоскости $(K, \bar{F})$ для несоразмерной структуры под действием синусоидальной движущей силы (8.75) с $F_{ac} = 0.2$ и $\tau_{ext} = 2\pi/\Omega = 5$. Триплеты (i, j, m) соответствуют запираанию на резонансных скоростях (показаны только домены для нескольких резонансных скоростей) [487].

Ω , уравнение СГ принимает форму

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \eta \frac{\partial u}{\partial t} + \sin u = A \sin(\Omega t + \phi). \quad (8.77)$$

Мы начнем с более простой ситуации, когда в системе имеется только *один кинк*. Давайте вначале рассмотрим очень простой пример движения одиночного атома массы m под действием силы $F(t)$,

$$m\ddot{X}(t) + m\eta\dot{X}(t) = F(t), \quad (8.78)$$

где $X(t)$ – координата атома, а η – вязкое торможение. Если периодическая сила включается в момент времени $t = 0$, то есть если $F(t < 0) = 0$ и $F(t \geq 0) = \text{Re}(F_0 e^{i\Omega t})$ [здесь $F_0 = -imAe^{i\phi}$ является комплексной для учета фазы ϕ], тогда динамика без трения ($\eta = 0$) описывается уравнением (8.78) принимающим тривиальную форму

$$X(t) = X_0 + V_0 t - \text{Re}[(F_0/m\Omega^2) e^{i\Omega t}], \quad (8.79)$$

где направление скорости атома $V_0 = \dot{X}(0) + \text{Im} F_0/m\Omega$ определяется начальным значением скорости $\dot{X}(0)$ и амплитудой и фазой осциллирующей силы $F(t)$ при $t = 0$. Таким образом, в общем случае скорость $V_0 \neq 0$, а чисто колебательное движение атома происходит только при определенных “резонансных” условиях, когда $\dot{X}(0) = -\text{Im} F_0/m\Omega$. Однако, очевидно что при любом ненулевом трении, $\eta > 0$, направленное движение будет убывать в течении времени $\tau \sim \eta^{-1}$, так что в установившемся состоянии атом будет только колебаться вблизи данной ячейки.

Возвращаясь к возмущенному уравнению СГ (8.77) и используя простейший подход метода коллективной координаты, описанный выше в параграфе 8.4, мы получаем следующее уравнение для координаты кинка $X(t)$ [731]

$$\ddot{X}(t) + \eta \left[1 - \dot{X}^2(t)/c^2\right] \dot{X}(t) = F(t)/m, \quad (8.80)$$

где m – масса покоя кинка, c – скорость звука, а внешняя периодическая сила $F(t)$ задается уравнением

$$F(t) = \sigma A \left[1 - \dot{X}^2(t)/c^2\right]^{3/2} \sin(\Omega t + \phi), \quad (8.81)$$

$\sigma = \pm 1$ – топологический заряд кинка. Таким образом, движение кинка качественно оказывается таким же как и в описанном выше случае единственного атома и точно совпадает с ним в нерелятивистском пределе $|\dot{X}(t)| \ll c$. Этот результат был получен аналитически и подтвержден численным моделированием Квинтеро и Санчеса [731] (специальные случаи $\phi = 0$ и $\pi/2$ при нулевой начальной скорости кинка, $\dot{X}(0) = 0$, впервые были рассмотрены Ольсеном и Самуэлсеном [733]).

Поведение кинка под действием аддитивной периодической силы становится более интересным, если кинк имеет внутреннюю (профильную) моду с частотой ω_B , что является типичной ситуацией для обобщенной модели ФК, например для несинусоидального потенциала подложки или негармонического межатомного взаимодействия. Этот вопрос был изучен by Quintero *et al.* [615] на примере модели ϕ^4 , где существует точно одна профильная мода. Действительно, они наблюдали строгий резонанс, но на частоте движущей силы $\Omega = \omega_B/2$, а не на нормальной резонансной частоте $\Omega = \omega_B$, как можно было бы ожидать. Объяснение этого состоит в том, что периодическая сила не действует прямо на профильную моду (из-за соображений симметрии резонанса), а скорее возбуждает профильную моду косвенно через вызов поступательного движения, которое затем взаимодействует

с профильной модой. Взаимодействие внутренних и трансляционных степеней свободы приводит в конце к блуждающему/хаотическому движению кинка при резонансной частоте из-за энергетического обмена между кинетической энергией центра кинка и внутренними колебаниями профиля кинка.

Дискретность модели ФК приводит к новым эффектам в движении кинка под действием периодической силы. Действительно, теперь кинк движется на периодическом потенциальном рельефе Пейерлса-Набарро. Таким образом, если пренебречь эффектами излучения и мягкости формы кинка, уравнение движения будет соответствовать движению затухающего маятника под действием периодической силы. В зависимости от значений параметров модели и начальных условий, такая система допускает широкое разнообразие различных типов поведения, включая так называемые бегущие траектории, которые являются аттракторами с ненулевой средней скоростью. Динамика модели ФК со слабой релаксацией под действием периодической силы была изучена численно Мартинезом с соавторами [735]. Для частного случая относительно низкого трения ($\eta \sim 0.1\omega_0$) и движущей силы ($\Omega \sim 0.5\omega_{PN}$) авторы обнаружили следующий сценарий поведения системы при увеличении амплитуды A . При малом A кинк будет захвачен одной ПН впадиной и будет совершать колебания вблизи ее дна с частотой внешней силы. При большом A кинк начинает прыгать в соседние ямы потенциала ПН. Такой тип движения связан с прерывностью I-типа (кинк в течение длительного времени остается в одной яме, затем внезапно совершает прыжок в другую яму и снова остается в ней в течение длительного времени). Частота этих прыжков растет вместе с A до достижения диффузионного движения кинка. Дальнейшее увеличение A в конце приводит к режиму со запертой модой, в котором средняя скорость кинка точно задается выражением $v_k = (p/q)a_s\Omega/2\pi$ с некоторыми взаимно простыми целыми числами p и q . Важной проблемой является то, что такое направленное движение появляется когда амплитуда движущей силы имеет порядок величины *ниже* депиннирующей постоянной силы при тех же самых значениях параметров модели. Заметим также, что если взять среднее по всем начальным условиям, то средняя скорость кинка будет нулевой из-за симметрии модели, направленное движение с положительной скоростью имеет такую же вероятность как и движение с отрицательной скоростью. Однако, если симметрия системы некоторым образом нарушена, возникает, как будет описано в следующей главе 9, выделенное направление движения.

Случай когда система СГ со слабой релаксацией ($\eta \sim 0.05\omega_0$) находится под действием одновременно постоянной и периодической сил, был изучен Фистулем с соавторами [736]. Для низкой частоты силы, $\Omega \sim 0.03\omega_0$, авторы нашли сильное убывание скорости кинка даже для относительно низких амплитуды периодической силы ($A < 1$). Этот эффект может быть интерпретирован как эффективное дополнительное “нелинейное трение” для движения кинка. Были получены аналитические оценки, находящиеся в хорошем согласии с результатами прямого численного моделирования и с экспериментальными результатами для длинных кольцевых цепочек Джозефсона с одним захваченным флаконом.

В случае без внешней силы, если трение η не равно нулю бризеры затухают, и их энергия рассеивается в излучение. Но если система находится под действием периодической аддитивной силы, тогда радиационные потери компенсируются внешней силой, так что бризер стабилизируется, а его частота модулируется внешней силой [737, 738]. Более тонкий сценарий возникает когда СГ бризер находится под действием аддитивной периодической силы в отсутствии трения. Используя как выше тот же самый подход коллективной координаты, Квинтеро и Санчес [731] показали, что в этом случае существует пороговая амплитуда A_c периодической силы (величина A_c зависит от частоты бризера), такая что малые возмущения ($A < A_c$) позволяют существовать бризерам (с частотами модулированными внешней силой), в то время как при большем возмущении, $A > A_c$, бризеры либо распадаются на кинк-антикинктовую пару, или он аннигилирует испуская излучение, если частота бризера была близка к фоновой зоне. Заметим, что подобный эффект стабилизации бризера существует также при параметрическом управлении [739].

Последний результат допускает механизм образования кинк-антикинктовых пар через промежуточную стадию возбуждения бризеров. Напомним, что если ОС соответствует тривиальной соразмерной структуры ($\theta = 1$), тогда кинки в системе появляются из-за термически активированного рождения кинк-антикинктовых пар.

Теперь давайте кратко рассмотрим случай когда находится под действием плоской волны. Из физики плазмы (или физики электронных пучков) хорошо известно что заряд (электрон) может захватываться электромагнитной волной и двигаться вместе с ней с той же самой скоростью. Можно ожидать подобного эффекта и в модели ФК. Действительно, такой эффект был численно обнаружен Женгом и Кросом [740]. Авторы изучили уравнение сверхвязкого движения

$$\dot{x}_l - g(x_{l+1} - 2x_l + x_{l-1}) + K \sin x_l = A \cos(\Omega t - 2\pi l \phi) \quad (8.82)$$

с периодическим граничным условием, когда число геометрических кинков вставленных в цепочку определяется параметром несоответствия $\delta = (a_s - a_A)/a_s$ ($a_s = 2\pi$ период потенциала подложки и a_A – среднее межатомное расстояние). Очевидно, что направленное движение отсутствует в случае $\delta = n$ (нет кинков для захвата) или $\phi = n$ (случай стоячий волны) (здесь n – некоторое целое, $n = 0, \pm 1, \dots$). Ток установившегося состояния $J = \langle \dot{x}_l(t) \rangle$ модели (8.82) имеет следующую симметрию: $J(\delta, \phi) = J(1 - \delta, 1 - \phi) = -J(\delta, 1 - \phi) = -J(1 - \delta, \phi)$. Таким образом, мы также должны иметь нулевой ток для $\delta = n + 1/2$ или $\phi = n + 1/2$.

Результаты моделирования показаны на рис. 8.32. Заметим, что для начала движения существует пороговая амплитуда управляющей силы (аналог барьера ПН). Максимальный ток достигается при $|\delta| \approx |\phi| \approx 0.12$. Для достаточно больших значений высоты потенциала подложки ток может достигать максимального значения $J = \Omega$ (см. плато на рис. 8.32(a). Как функция K , ток при малых K ведет себя $J \propto K^2$, а при больших K демонстрирует запирающие моду резонансы как показано на рис. 8.32(b). Так как любое динамическое состояние сверхвязкой модели ФК должно быть ротационно упорядоченным, то можно показать, что ток на резонансных ступенях описывается соотношением $J = [(j\delta + k)/(j\phi_1 + m)]\Omega$ с целыми j, k и m в согласии с результатами моделирования.

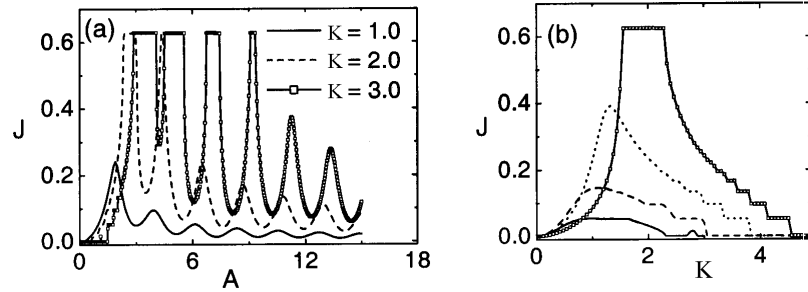


Рис. 8.32. Зависимость среднего тока J модели (8.82) от (а) амплитуды волны A для различных значений K (сплошная кривая для $K = 1$, пунктирная кривая для $K = 2$, и сплошная кривая с квадратными маркерами для $K = 3$) и (б) от высоты барьера K для различных значений A (сплошная кривая для $A = 1$, пунктирная кривая для $A = 1.5$, точечная кривая для $A = 2$, и сплошная кривая с квадратными маркерами для $A = 2.5$). Остальные параметры: $g = 1$, $\Omega/2\pi = 0.1$, and $\delta = \phi = 0.09$ [740].

Ратчеты

Стандартная модель ФК описывает симметричный потенциал подложки. Однако, если симметрия системы некоторым образом нарушена, то появляются связанные с этим новые эффекты - так называемая *пилообразная* или *ратчет* (*ratchet*) динамика. Система под действием внешнего возмущения, демонстрирует ратчет динамику если средний ток определенный как

$$\langle \dot{x} \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} [x(t) - x(0)]/t,$$

не равен нулю когда *все* макроскопические (“coarse grained”) внешние возмущения, стационарные силы и градиенты (температуры, концентрации, химического потенциала, и т.д.) равняются нулю после усреднения по пространству, времени, и статистическим ансамблям. В настоящее время системы с ратчет динамикой привлекают большое внимание, так как их использование позволяет объяснить физику действия молекулярных моторов и молекулярных помп, а также открывает новые возможности для различных применений нанотехнологии.

9.1 Предварительные замечания

Для того чтобы демонстрировать ратчет динамику, система *должна* удовлетворять следующим двум условиям:

- (i) Система должна быть вне теплового равновесия. Это требование возникает из-за того, что система в равновесии не может демонстрировать систематическое смещение в выделенном направлении в силу второго закона термодинамики. Следовательно, система должна находиться под действием некоторого внешнего возмущения, для примера, под действием внешней силы $F(t)$ с нулевым средним значением, $\langle F(t) \rangle = 0$ (действие может быть либо периодическим, либо стохастическим, но в последнем случае оно должно соответствовать цветному шуму). В параграфе 8.11 мы упоминали, что под действием периодической силы кинк может демонстрировать направленное движение. Однако, если усреднить по всем начальным условиям, то в этом случае средняя скорость направленного движения будет равна нулю, в силу симметрии системы. Таким образом, нам необходимо еще одно условие.
- (ii) Должна быть нарушена пространственно-временная симметрия системы, либо из-за асимметричного потенциала подложки, либо из-за асимметричной силы или одновременно из-за двух этих причин. Строгие правила были сформулированы Флахом и др. [741] и Райманом [742]. Они будут описаны ниже в параграфе 9.2.1.

Если эти условия выполнены, тогда система может демонстрировать ратчет динамику. Возникают следующие вопросы:

1. Каким будет направление движения и как можно управлять им? Для некоторых простых моделей можно предсказать или предположить направление дрейфа исходя из соображений симметрии, но часто направление движения зависит от всех особенностей потенциала и внешней силы.
2. Какова “эффективность” такой ратчет машины? А именно, как ток зависит от приложенной силы для данной модели?

Ратчет поведение может быть организовано многими способами. Действительно, класс асимметричных систем намного больше подкласса симметричных систем. Фактически вопрос состоит не в том, когда появляется ратчет поведение, а в том, когда систематический дрейф отсутствует из-за (иногда скрытой) симметрии системы.

Типичный потенциал подложки, используемый в ратчет моделях, имеет косинусоидальную форму с добавочной второй гармоникой (см. рис. 9.1),

$$V(x) = -\cos x + \mu \cos(2x + \varphi). \quad (9.1)$$

Внешняя сила $F(t)$ может соответствовать, например, (i) синусоидальной функции, (ii) симметричному дихотомному шуму, (iii) процессу Орнштейна-Уилбека (экспоненциально коррелированному шуму), (iv) симметричному *импульсному* шуму, и т.д., или их произвольной линейной комбинации.

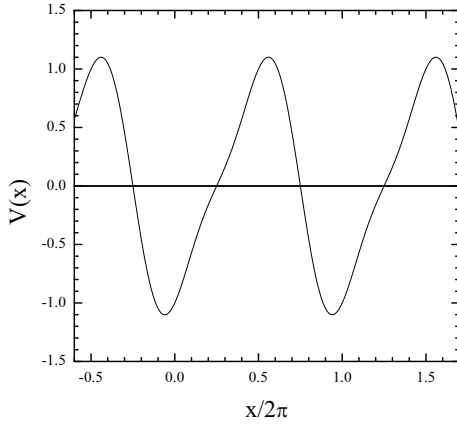


Рис. 9.1. Пилообразный (ратчет) потенциал (9.1) при $\mu = -1/4$ и $\varphi = \pi/2$.

Для простейшего случая единичного атома на внешнем потенциале мы можем разделить различные типы ратчет систем на *диффузионные ратчеты* и *инерционные ратчеты*. Когда модель описывает систему взаимодействующих атомов, то из-за взаимодействия могут возникать дополнительные коллективные эффекты. Их мы рассмотрим ниже в параграфе 9.3 на примере ФК модели.

9.2 Различные типы Ратчетов

9.2.1 Суперсимметрия

Прежде всего, следуя работе Раймона [742] (см. также работы [743, 744]), мы сформулируем общие условия когда *не может существовать* направленного движения. Мы начнем со следующих простых определений симметричности:

1. Периодический потенциал подложки является *симметричным*, если для всех x

$$V(-x) = V(x). \quad (9.2)$$

2. Периодический потенциал называется *суперсимметричным*, если для всех x

$$V(x + a_s/2) = -V(x). \quad (9.3)$$

3. Внешняя периодическая сила $F(t) = F(t + \tau)$ называется *симметричной*, если для любого момента времени t

$$F(t + \tau/2) = -F(t). \quad (9.4)$$

4. Периодическая сила называется *суперсимметричной*, если она антисимметрична для всех t ,

$$F(-t) = -F(t). \quad (9.5)$$

Эти соотношения допускают соответствующие сдвиги, например уравнение (9.3) означает, что $V(x + a_s/2) = -V(x) + \Delta V$, но мы можем всегда положить $\Delta V = 0$ из-за бесполезности аддитивных постоянных для потенциала. Аналогично, уравнение (9.5) означает, что существует такое Δt , что $F(-t) = -F(t + \Delta t)$, и затем Δt занулить за счет сдвига по шкале времени. Последние два определения остаются справедливыми для стохастической силы (несмещенной и стационарной) если мы перепишем, например, уравнение (9.5) в форме

$$\langle F(-t_1)F(-t_2) \dots F(-t_n) \rangle = (-1)^n \langle F(t_1)F(t_2) \dots F(t_n) \rangle \quad (9.6)$$

и предположим, что оно выполняется для всех целых $n \geq 1$ и для всех времен $t_1, t_2, \dots, t_n$.

Теперь, основное утверждение состоит в следующем: для уравнения движения с аддитивной внешней силой,

$$\eta \dot{x}(t) + V'(x) = F(t) + \delta F(t), \quad (9.7)$$

где $\dot{x} \equiv dx/dt$, $\delta F(t)$ – гауссов белый шум, *направленное движение отсутствует, т.е. $\langle \dot{x} \rangle = 0$, только если либо одновременно потенциал подложки $V(x)$ и движущая сила $F(t)$ являются симметричными, или если они одновременно являются суперсимметричными.* Для всех остальных комбинаций в общем случае $\langle \dot{x} \rangle \neq 0$.

Случай одновременной симметричности потенциала и движущей силы не требует доказательства, отсутствие направленного движения просто следует из соображений симметрии. Для случая когда потенциал и движущая сила одновременно являются суперсимметричными, доказательство состоит в следующем: введя $z(t) = x(-t) + a_s/2$, мы будем иметь $\dot{z}(t) = -\dot{x}(-t)$, так что $\langle \dot{z} \rangle = -\langle \dot{x} \rangle$. С другой стороны, учитывая условия суперсимметричности (9.3) и (9.5), можно проверить что $z(t)$ удовлетворяет тому же уравнению (9.7) как и $x(t)$, так что $\langle \dot{z} \rangle = \langle \dot{x} \rangle$. Таким образом, мы получаем $\langle \dot{x} \rangle = 0$. Это доказательство основано на факте что уравнении (9.7) приводит только к *стационарным* стохастическим процессам.

Типичные комбинации потенциалов и движущих сил показаны на рис. 9.2: ненулевой ток появляется в случаях (a) и (b), но отсутствует для случая (c), когда потенциал и движущая сила одновременно являются суперсимметричными.

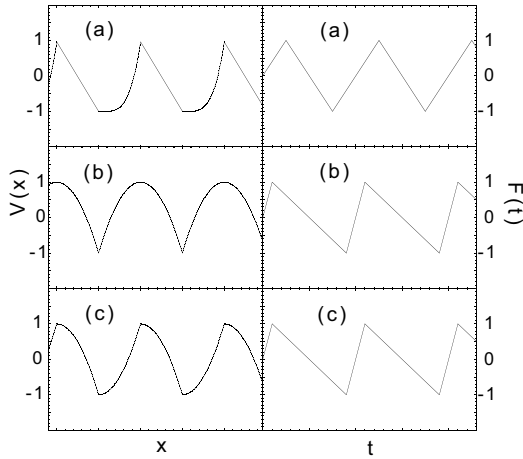


Рис. 9.2. Три комбинации периодического потенциала подложки $V(x)$ и внешней движущей силы $F(t)$: (a) $V(x)$ асимметрична (но не суперсимметрична), а $F(t)$ симметрична (и в то же самое время суперсимметрична), $\langle \dot{x} \rangle \neq 0$; (b) $V(x)$ симметрична (но не суперсимметрична), а $F(t)$ суперсимметрична (и симметрична), $\langle \dot{x} \rangle \neq 0$; (c) $V(x)$ и $F(t)$ одновременно суперсимметричны и $\langle \dot{x} \rangle = 0$ [742].

Далее мы рассмотрим случай параметрической силы,

$$\eta \dot{x}(t) + V'[x(t), F(t)] = \delta F(t), \quad (9.8)$$

где $V'(x, F) = \partial V(x, F)/\partial x$. Критерий симметрии теперь принимает форму

$$V[-x, F(t)] = V[x, F(t)], \quad (9.9)$$

в то время как критерий суперсимметричности должен быть переписан в следующем виде,

$$V[x + a_s/2, F(-t)] = -V[x, F(t)]. \quad (9.10)$$

Если любой из критериев (9.9) или (9.10) удовлетворяется, то следствием этого является обнуление тока в (9.8), в то время как в общем случае ожидается ненулевой ток.

9.2.2 Диффузионные ратчеты

Рассмотрим различные типы *диффузионных ратчетов*, когда можно пренебречь эффектами инерции. Большинство моделей рассмотренных ниже, показывают существование порогового значения силы, ниже которого нет направленного усредненного тока. Объяснение существования этого порога следующее [745]. В пределе линейного отклика, который должен работать для силы с малой амплитудой, внешнее возмущение можно разложить в ряд Фурье. Тогда, в линейном пределе, полный ток будет суммой вкладов от всех мод. Так как каждая мода Фурье является симметричной, то результирующий ток должен исчезать.

Другое общее замечание состоит в том, что ток $\langle \dot{x} \rangle$ в пределе $T \rightarrow \infty$ должен исчезать, в силу конечности потенциала и движущей силы. Следовательно, для моделей в которых ток также стремится к нулю при $T \rightarrow 0$, следует ожидать колоколообразную зависимость тока от температуры. Более того, из тех же соображений следует ожидать существование оптимальных значений частоты Ω и амплитуды A движущей силы, при которых ток достигает своего максимального значения.

Наконец, для того чтобы оценить эффективность частной ратчет схемы, можно добавить постоянную силу F_{dc} к правой части уравнения (9.7) или (9.8) и затем искать так называемую *останавливающую силу* F_s , при которой направленный ток исчезает. Чем больше значение $|F_s|$, тем более эффективным является ратчет, например, тем больший “груз” он может “перенести” с собой.

Тепловые ратчеты

Простая модель *тепловых ратчетов* (известных также как *броуновские моторы*, *броуновские выпрямители* и *стохастические ратчеты*) описывается уравнением

$$\eta \dot{x}(t) + V'(x) = \delta F(t), \quad (9.11)$$

в котором белый гауссов шум подвергается периодическим вариациям с периодом τ : $\langle F(t)F(0) \rangle = 2\eta k_B T(t)\delta(t)$, где $T(t+\tau) = T(t)$. Для асимметричного потенциала подложки $V(x)$ решение уравнения (9.11) соответствующее установившемуся состоянию характеризуется током, $\langle \dot{x} \rangle \neq 0$. Механизм этого явления объяснен на рис. 9.3: броуновские частицы, начально локализованные в точке x_0 минимума потенциала $V(x)$, разбрасываются из нее когда температура достигает максимального значения. Когда температура возвращается обратно к низкому значению, большинство частиц снова захватывается зоной притяжения частицы x_0 , но существенно то, что часть частиц захватывается зоной притяжения точки $x_0 + a_s$ (заштрихованная область на рис. 9.3), и в результате в цепи образуется поток частиц ($\langle \dot{x} \rangle > 0$). Эффективность теплового ратчета может быть оценена с помощью теории возмущения [746], которая при малых τ приводит к оценке

$$\langle \dot{x} \rangle \approx C\tau^2 \int_0^{a_s} dx V'(x) [V''(x)]^2, \quad (9.12)$$

где постоянная $C > 0$ зависит от формы функций $V(x)$ и $T(t)$. Очевидно, что если система находится в тепловом равновесии, то в пределе $\tau \rightarrow \infty$ ток должен стремиться к нулю. Так, максимальное значение тока достигается при оптимальном значении периода $\tau \sim \eta^{-1}$.

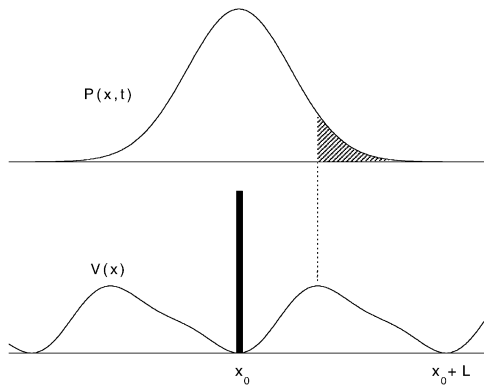


Рис. 9.3. Механизм работы теплового ратчета (9.11). Практически такой же механизм работает и в случае когда температура остается фиксированной (но $T > 0$), но вместо неё “включается” и “выключается” потенциал подложки, как показано ниже на рис. 9.4 [745].

Эта очень простая модель теплового ратчета (9.11) также демонстрирует так называемый эффект *обращения тока*. А именно, для специально выбранной формы потенциала подложки (конкретные примеры потенциалов $V(x)$ с эффектом обращения можно посмотреть в работе [745]) ток может быть отрицательным при малых τ и становиться положительным при больших значениях τ . Таким образом, при изменении одного параметра τ ток меняет свой знак. Этот эффект будет сохраняться и при изменении любых других параметров модели, например, при изменении коэффициента трения η . Этот эффект создает возможность разделения частиц: например, броуновские частицы с разными размерами будут иметь различные коэффициенты трения и будут двигаться в противоположных направлениях на одном и той же подложке под действием одного и того же теплового окружения. Более того, если учесть эффекты инерции, то такой механизм разделения частиц может быть введен относительно масс частиц, так же как и для других динамических свойств частиц.

Представленные выше аргументы могут быть обобщены следующим образом [746]: для ратчет модели типа (9.8) (возможно также для моделей с зависимостью температуры от x и/или t), которая зависит от произвольного параметра модели μ , существует форма потенциала подложки $V_{ci}[x, F(t)]$, такая что ток $\langle \dot{x} \rangle$ как функция от μ демонстрирует обращения тока при некотором значении μ_0 , но *если и только если* существует два потенциала $V_1[x, F(t)]$ и $V_2[x, F(t)]$ с противоположными токами $\langle \dot{x} \rangle$ для данного значения μ_0 . Для доказательства этого, мы должны сконструировать потенциал $V_\lambda[x, F(t)] = \lambda V_1[x, F(t)] + (1 - \lambda) V_2[x, F(t)]$, который непрерывно зависит от параметра λ . Из предположения о непрерывной зависимости тока $\langle \dot{x} \rangle$ от параметра λ , следует что он должен быть равным нулю при некотором промежуточном значении $\lambda = \lambda_0$. Следовательно модель с потенциалом $V_{ci}[x, F(t)] = V_{\lambda_0}[x, F(t)]$ должна показывать обращения тока при изменении параметра μ . То же самое справедливо для ратчет модели (9.7) с аддитивной движущей силой, для которой тем же самым путем можно сконструировать силу $F_\lambda(t) = \lambda F_1(t) + (1 - \lambda) F_2(t)$.

Если температура не зависит от времени, но меняется периодически в пространстве, $T(x + a_s) = T(x)$, то модель называется *термоэлектрическим ратчетом*. В общем случае, для этой модели ток будет ненулевым, если и только если $\int_0^{a_s} dx V'(x)/T(x) \neq 0$ (см. работу [745] и приведенные в ней ссылки). Заметим, что в математическом смысле, оба эти ратчета (термический и термоэлектрический) эквивалентны рассмотренному ниже ратчету с флуктуирующим потенциалом.

Пульсирующие ратчеты

Параметрически управляемые ратчеты (также называемые *пульсирующими ратчетами*) описываются уравнением (9.8). Подкласс пульсирующих ратчетов образуют так называемые *ратчеты с пульсирующим потенциалом*, когда потенциал имеет форму

$$V[x, F(t)] = [1 + F(t)] V(x), \quad (9.13)$$

то есть вынуждающая сила $F(t)$ описывает “возмущение” к “невозмущенному” потенциалу подложки $V(x)$ не затрагивающее его пространственную периодичность. Более специфическим, но и более важным является пример пульсирующих ратчетов действующих по принципу “*включение-выключение*”, когда сила $F(t)$ в уравнении (9.13) может принимать только два возможных значения, например $F(t) = -1$ (потенциал “выключен”) и $F(t) = 0$ (потенциал “включен”). Схема действия этого двухпозиционного пульсирующего ратчета при ненулевой температуре $T > 0$ показана на рис. 9.4. Как правило, “естественным” направлением тока в пульсирующих ратчетах является направление задаваемое знаком наиболее крутого наклона потенциала. Заметим также, что когда в моделях (9.8), (9.13) температура равна нулю, тогда уравнение движения $\eta \dot{x} + [1 + F(t)] V'(x) = 0$ сводится к простой форме $\eta \dot{y} = 1 + F(t)$ с помощью подстановки $y(x) = -\int^x dx' / V'(x')$. Подобное упрощение также возможно когда обе силы $F(t)$ и $\delta F(t)$ в модели (9.8), (9.13) соответствуют стохастическому процессу того же самого типа, например, они описываются двумя (взаимно некоррелированными) процессами Орнштейна-Уилбека с одним и тем же временем корреляции τ_c .

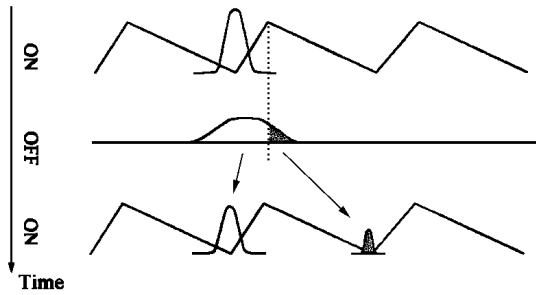


Рис. 9.4. Схематический рисунок действия двухпозиционного пульсирующего ратчета при температуре $T > 0$. Вероятность распределения одной частицы расширяется когда потенциал подложки выключен; это вызывает направленное движение в наиболее жестком направлении потенциала, когда он снова включается (движение происходит против пила потенциала) [747].

Другим подклассом пульсирующих ратчетов являются так называемые *движущиеся потенциальные ратчеты*, имеющие потенциал формы

$$V[x, F(t)] = V[x - F(t)], \quad (9.14)$$

где $F(t)$ – периодическая или стохастическая функция. [В этом случае, когда $F(t)$ является неограниченной функцией, например $F(t) = c_{\text{wave}} t$, подстановка $y = x - F$ сводит все к задаче с постоянной силой, $\eta \dot{y} + V'(y) = -\eta c_{\text{wave}} + \delta F(t)$, так что частица захватывается движущейся волной и двигается с той же самой (*броуновский серфингист*) или меньшей (*броуновский пловец*) скоростью в том же самом направлении. Однако, если учесть эффекты инерции и цветность шума, то может иметь место и инверсия направления движения [748].] Этот потенциал никогда не удовлетворяет критерию симметрии (9.9), не зависимо от того является ли сам потенциал $V(x)$ симметричным или нет. Таким образом, здесь можно ожидать появление ратчета даже при симметричной форме потенциала $V(x)$. Действительно, подстановка $y = x - F$ преобразует ратчет (9.14) в ратчет качения, который мы рассмотрим далее в параграфе 9.2.2.

Пример обобщения этого типа ратчетов дали Порто с соавторами [749]. Потенциал подложки представлял из себя композицию двух волн двигающихся относительно друг друга,

$$V[x, F(t)] = V_{\alpha_1}(x) + V_{\alpha_2}[x - F(t)], \quad (9.15)$$

а профиль волны $V_{\alpha}(x)$ был взят в простой форме кусочно линейной функции определенной на интервале $(0, 1]$,

$$V_{\alpha}(x) = \begin{cases} -1 + 2x/\alpha, & \text{если } 0 < x \leq \alpha < 1, \\ 1 - 2(x - \alpha)/(1 - \alpha), & \text{если } 0 < \alpha < x \leq 1, \end{cases} \quad (9.16)$$

которая затем была по периодичности продолжена на всю ось x . За исключением симметричного случая $\alpha_1 = \alpha_2 = 1/2$, система всегда демонстрирует ратчетное поведение. Действительно, из последовательности картинок на рис. 9.5 можно видеть, что при монотонно увеличивающейся F атомы в среднем остаются в том же самом положении (см. заполненные окружности на картинках), в то время как при монотонно убывающей силе атомы двигаются налево (пустые окружности на картинках). Таким образом, для любого непредубежденного принуждения $F(t)$, периодического или стохастического, если его максимальная амплитуда превышает 1 (период потенциала подложки), атом будет двигаться только налево, и такое поведение не зависит существенно от профиля потенциала $V_\alpha(x)$. Необратимость движения возникает из-за существования точек неустойчивости в плоскости (x, F) , в которых у асимметричного потенциала $V(x, F)$ отсутствует локальный минимум. Когда минимум исчезает, частица локализованная в такой точке начинает совершать *необратимое* движение прыгая в направлении даваемом асимметрией потенциала (см. детали в работе [749]).

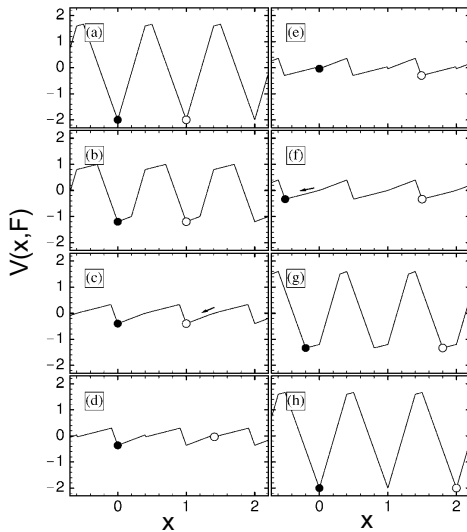


Рис. 9.5. Временная эволюция пульсирующего ратчет потенциала (9.15), (9.16) с $\alpha_1 = 2/5$ и $\alpha_2 = 1/2$. Снимки взяты при (a) $F = 0$, (b) $F = 0.2$, (c) $F = 0.4$, (d) $F = 0.41$, (e) $F = 0.49$, (f) $F = 0.5$, (g) $F = 0.8$, и (h) $F = 1$. Параллельно показано соответствующие положения частиц в “квазистатическом” пределе, для обоих значений $\dot{F}(t) > 0$ [например, $F(t) = t$, полные окружности, временная эволюция от (a) к (h)] и $\dot{F}(t) < 0$ [например, $F(t) = -t$, полые окружности, временная эволюция в противоположном направлении от (h) к (a)]. Стрелка показывает направление необратимого движения частицы которое происходит между снимками (e) и (f) (полные окружности) и (d) и (c) (открытые окружности) [749].

Дальнейшее обобщение допускающее инверсию тока, основывается на двух потенциалах двигающихся в противоположных направлениях: $V_\lambda[x, F(t)] = \lambda V_1(x + c_{\text{wave}}t) + (1 - \lambda) V_2(x - c_{\text{wave}}t)$ с подходящим выбором функций $V_1(x)$ и $V_2(x)$ и параметра λ [745].

Ратчеты качения

Далее давайте рассмотрим так называемые *ратчеты качения*, также называемые *наклонными ратчетами*, то есть ратчеты приводимые в движение аддитивной периодической силой. Простейшее рассмотрение можно провести в адиабатическом пределе, когда изменение силы $F(t)$ в уравнении (9.7) является таким медленным, что система успевает достичь установившегося состояния для каждого значения силы. В этом случае поток будет нулевым при нулевой температуре (или экспоненциально малым если $T > 0$) до того как $F(t)$ превысит максимум наклона потенциала подложки в данном направлении; после этого ток принимает значение близкое к максимуму $F(t)/\eta$. Таким образом, когда периодическая сила является симметричной чистый ток в системе (усредненный по периоду τ) будет ненулевым, если и только если потенциал подложки является пространственно асимметричным и амплитуда A управляющей силы превосходит пороговое значение A_0 определяемое наклонами потенциала $V(x)$. Легко понять, что в этом случае атом будет предпочтительно двигаться в направлении где он должен подниматься на более пологую сторону потенциала подложки, то есть направление потока здесь является противоположным к “естественному” направлению ратчета с флуктуирующим потенциалом. Если $T > 0$, тогда стохастическая сила будет способствовать прохождению броуновской частицы через потенциальные барьеры, следовательно направленное движение будет начинаться при меньших значениях амплитуды осциллирующей силы.

Предел быстро осциллирующей силы с периодом $\tau = 2\pi/\Omega \rightarrow 0$ является более сложным для аналитического рассмотрения. Когда $F(t)$ симметрична, а потенциал $V(x)$ асимметричен то подход основанный на теории возмущения дает результат [745]

$$\langle \dot{x} \rangle = \frac{2\tau^4 Y \mathcal{N}}{\eta^5} \int_0^{a_s} \frac{dx}{a_s} V'(x) [V'''(x)]^2, \quad (9.17)$$

в то время в случае когда $F(t)$ асимметрична, а потенциал $V(x)$ симметричен, ток задается выражением

$$\langle \dot{x} \rangle = \frac{\tau^4 \mathcal{N}}{4\eta^5} \left\{ Y_- \int_0^{a_s} \frac{dx}{a_s} [V'''(x)]^2 + \frac{1}{2} \beta Y_+ \int_0^{a_s} \frac{dx}{a_s} [V''(x)]^3 \right\}. \quad (9.18)$$

В уравнениях (9.17), (9.18) $\mathcal{N}$ является нормировочной константой,

$$\mathcal{N} = \left[\left(\int_0^{a_s} \frac{dx}{a_s} e^{-\beta V(x)} \right) \left(\int_0^{a_s} \frac{dx}{a_s} e^{+\beta V(x)} \right) \right]^{-1}, \quad (9.19)$$

$\beta = (k_B T)^{-1}$, а амплитуды Y , $Y_{\pm}$ задаются интегралами

$$Y = \int_0^1 dh [f_2(h)]^2, \quad Y_{\pm} = \int_0^1 dh [f_0(h) \pm 2f_2(h)] [f_2(h)]^2 \quad (9.20)$$

от функций $f_i(h)$ определенных через рекуррентное соотношение $f_i(h) = \int_0^h ds f_{i-1}(s) + \int_0^1 ds s f_{i-1}(s)$ ($i = 1, 2, \dots$) с $f_0(h) = F(\tau h)$. Согласно этим результатам, rocked ратчеты являются очень неэффективными, все вклады до порядка τ^3 являются нулевыми.

Знак тока в уравнении (9.17) определяется самым крутым наклоном $V(x)$ (для достаточно простых потенциалов подложки) независимо от деталей симметричности силы $F(t)$. таким образом, “естественное” направление тока быстрого и медленного ратчета качения противоположны. Следовательно, для ратчетов качения является типичным инверсия тока с изменением частоты управляющей силы Ω .

Как пример, давайте рассмотрим простой случай детерминированного ратчета, когда в уравнении (9.7) $\delta F(t) \equiv 0$, потенциал подложки имеет типичную асимметричную (“пилообразную”) форму заданную уравнением (9.1), а управляющая сила является чисто синусоидальной

$$F(t) = A \sin(\Omega t). \quad (9.21)$$

Для этой модели, решение уравнения (9.7) является ограниченными при амплитудах силы $A < A_0(\Omega)$, так как оно приближается функцией, которая является периодической по времени с большим периодом [750]. При $A > A_0(\Omega)$, движение может становиться неограниченным, и усредненная скорость принимает асимптотическое значение (независящее от начальных условий) вида $\langle \dot{x} \rangle = (m/n) \Omega$ с целыми m и n (напомним, что в наших системных единицах $a_s = 2\pi$). Такое поведение, когда ток как функция амплитуды управляющей силы, показывает структуру с постоянными плато разделенными разрывными скачками, является типичным для детерминированного ратчета качения в сверхвязком пределе (см. работу [745] и приведенные в ней ссылки).

Для пилообразного потенциала (9.1) с $\mu = -1/4$ и $\varphi = \pi/2$, чистый поток всегда положителен ($m, n > 0$), то есть частица двигается по направлению наиболее плоской стороны потенциала в случае $T = 0$. Однако, если температура ненулевая, имеет место инверсия тока для достаточно большой частоты Ω в соответствии с результатами теории возмущения (9.17).

Ратчеты с флуктуирующей силой

Наконец, если сила $F(t)$ в уравнении (9.7) соответствует стохастическому процессу, тогда модель принадлежит к типу *ратчетов с флуктуирующей силой*, которые могут быть рассмотрены как другой подкласс *наклонных ратчетов*. Как мы упоминали уже несколько раз, эффекты ратчета могут иметь место только в случае цветного шума, когда время корреляции $\tau_c = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \langle F(t)F(0) \rangle / A > 0$, где амплитуду шума $A = \langle F^2(0) \rangle$.

Случай медленно флуктуирующей силы, период $\tau_c \rightarrow \infty$, может быть описан адиабатическим приближением тем же путем как было сделано выше в параграфе 9.2.2 для rocked ратчетов. С другой стороны, в случае быстро флуктуирующей силы, период $\tau_c \rightarrow 0$, скорость ратчета может быть найдена с помощью теории возмущения, которая приводит к выражению (см. работу [745] и приведенные в ней ссылки)

$$\langle \dot{x} \rangle = -\tau_c^3 \frac{\beta A \mathcal{N}}{\eta} \left\{ Y_1 \int_0^{a_s} \frac{dx}{a_s} V'(x) [V''(x)]^2 + A \beta^2 Y_2 \int_0^{a_s} \frac{dx}{a_s} [V'(x)]^3 \right\}, \quad (9.22)$$

где Y_1 и Y_2 являются безразмерными и τ_c -независимыми коэффициентами определяемыми спецификой рассматриваемого шума, а постоянная нормализации $\mathcal{N}$ задается уравнением (9.19). Например, для стохастической силы с экспоненциально коррелированным шумом (так называемый процесс Оренштейна-Уилбека), $\langle F(t)F(0) \rangle = (D/\tau_c) \exp(-|t|/\tau_c)$ коэффициенты $Y_1 = 1$ и $Y_2 = 0$. Интересно, что в этом случае направления тока в двух пределах $\tau_c \rightarrow \infty$ и $\tau_c \rightarrow 0$ является противоположными друг другу, так что при изменении времени корреляции τ_c имеет место инверсия тока. Как следует из уравнения (9.22), действие флуктуирующей силы не является очень эффективным для создания тока, первый ненулевой вклад появляется только в третьем порядке от τ_c .

9.2.3 Инерционные ратчеты

Включение инерционного члена $m\ddot{x}$ в уравнение движения делает динамику системы значительно более сложной из-за увеличения размерности фазового пространства. Для одно-атомного ратчета управляемого аддитивной силой уравнения движения теперь будет иметь следующий вид,

$$\ddot{x}(t) + \eta \dot{x}(t) + V'[x(t)] = F(t) + \delta F(t), \quad (9.23)$$

где $V(x)$ – периодический потенциал с периодом a_s , а $F(t)$ – периодическая сила с периодом τ . Теперь ток будет нулевым в случае симметричного потенциала и симметричной управляющей силы, но не в случае суперсимметричности этих функций, как это было в сверхвязком случае.

Несколько работ были посвящены подклассу инерционных ратчетов, а именно *детерминированным* инерционным ратчетам, когда температура равна нулю, то есть в уравнении (9.23) $\delta F(t) \equiv 0$ (см. работу [745] и приведенные в ней ссылки). В этом случае стохастическое поведение может появляться в некоторых областях значений параметров модели. Другая сложность состоит в том, что теперь долго-временное усреднение тока в общем случае зависит от начальных условий. Как следствие, ток как функция параметров модели может демонстрировать довольно сложное поведение, включая многократные инверсии даже для простой формы потенциала подложки.

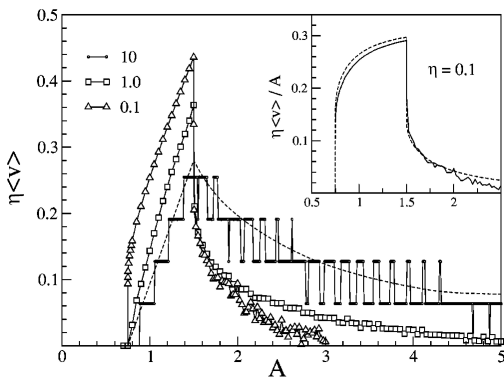


Рис. 9.6. Средняя скорость $\langle \dot{x} \rangle$ (на временах затухания η) как функция амплитуды A осциллирующей силы (9.21) с частотой $\Omega = 0.01$ для ратчет потенциала (9.1) и различных значений коэффициента трения η . Пунктирная кривая соответствует сверхвязкому адиабатическому пределу ($\eta = 10$, $\Omega = 10^{-4}$). Вставка: сравнение численных данных для $\eta = 0.1$ (сплошная кривая) с аналитической зависимостью (9.24), показанной пунктирной кривой [751].

Адиабатический режим детерминированного ратчета с потенциалом подложки (9.1) и управляющей силой (9.21) было изучено Боромео с соавторами [751]. Вычисленные зависимости тока от силы для различных значений коэффициента трения η показаны на рис. 9.6. Для значений трения в области $0.07 < \eta < 0.5$ эти зависимости демонстрируют универсальное поведение показанное на вставке рис. 9.6 и описываются функцией

$$\langle \dot{x} \rangle = \frac{A}{\eta} \cdot \begin{cases} \mu(A, A_-) & \text{если } A_- < A < A_+, \\ \mu(A, A_-) - \mu(A, A_+) & \text{если } A > A_+. \end{cases} \quad (9.24)$$

Здесь $\mu(A, A') \propto 1 + \sqrt{1 - (A'/A)^2}$, а амплитуды A_- и A_+ соответствуют порогам депининга (правого/левого) наклона потенциала $V(x) \mp xA$. Уравнение (9.24) было получено в предположении что частица депинингуется при $F(t) > A_-$, затем бежит со скоростью $v(t) \propto F(t)/\eta$, и снова пинингуется как только сила $F(t) < (\eta/\omega_0) A_-$ согласно анализу Рискена в параграфе 8.2.2 (см. детали в работе [751]). Таким образом, эти результаты показывают, что эффективность выпрямления ратчета растет как η^{-1} , когда трение уменьшается, но только до некоторого критического значения трения $\eta^* \sim 0.07$. При дальнейшем убывании трения η ниже η^* , траектории становятся экстремально нерегулярными и ратчет ток монотонно стремится к нулю.

Известны некоторые строгие результаты в гамильтоновом пределе нулевого трения и теплового шума, когда уравнение движения принимает форму

$$\ddot{x}(t) + V'[x(t)] = F(t). \quad (9.25)$$

Следуя работе Флаха и др. [741], давайте скажем что система является S_a -симметричной, если оба потенциал подложки и управляющая сила удовлетворяют следующим двум условиям,

$$\begin{cases} V(-x + \Delta x) = V(x) & \text{и} \\ F(t + \tau/2) = -F(t), \end{cases} \quad (9.26)$$

где Δx некоторая постоянная (заметим, что второе уравнение совпадает с условием симметричности сверхвязкого случая – см. уравнение (9.4)). В этом случае, если $x(t)$ является решением уравнения (9.25), тогда траектория $z(t) = -x(t + \tau/2) + \Delta x$ также удовлетворяет тому же самому уравнению.

Далее, давайте скажем что система будет S_b -симметричной, если сила $F(t)$ удовлетворяет условию $F(-t + \Delta t) = F(t)$ с некоторой постоянной Δt . теперь траектория $z(t) = x(-t + \Delta t)$ удовлетворяет уравнению (9.25) при условии что $x(t)$ является решением этого уравнения.

В обоих случаях, импульс меняет свой знак при симметричном преобразовании $\dot{z}(t) = -\dot{x}(t)$. Следовательно, если система имеет или S_a симметрию или S_b симметрию, то чистый ток усредненный относительно *всех* начальных условий, должен быть нулевым, т.е. $\langle \dot{x} \rangle = 0$. Во всех остальных случаях следует в общем ожидать ненулевой средний ток, если нет ни каких других скрытых симметрий, которые изменяют знак импульса.

Если рассмотреть данную частную траекторию в системе с описанной выше симметрией, тогда следует ожидать равенство $\langle \dot{x} \rangle = 0$ для данной траектории в предположении, что начальное условие $\{x(0), \dot{x}(0)\}$ является частью стохастического слоя, который также содержит начальное условие с $\dot{x} = 0$. Смысл этого основан на предположении эргодичности стохастических слоев. С другой стороны, если начальное условие $\{x(0), \dot{x}(0)\}$ для данной траектории не является частью стохастического слоя, который также содержит начальное условие с $\dot{x} = 0$, то в общем случае $\langle \dot{x} \rangle \neq 0$ даже если выполнены описанные выше условия симметричности.

Хотя это может быть трудным практически, в принципе все фазовое пространство Гамильтоновой динамики (9.25) может быть разделено на свои разные регулярные и эргодические компоненты, каждая из которых характеризуется своим собственным током частиц $\langle \dot{x} \rangle$. Шанц и др. [752] показали, что ток частиц “полностью усреднен” согласно равномерной (микроканонической) плотности фазового пространства и может быть записан как

$$\int_0^\tau dt \int_0^{a_s} dx \int_{-\infty}^\infty dp \dot{x} = \lim_{p_0 \rightarrow \infty} \int_0^\tau dt \int_0^{a_s} dx \int_{-p_0}^{p_0} dp \frac{\partial H}{\partial p}. \quad (9.27)$$

Так как динамика является Гамильтоновой, гамильтониан $H = \frac{1}{2}p^2 + V(x) - xF(t)$, то из этого следует что скорость усредненная по всем эргодическим компонентам с учетом микроканонического веса равна нулю. Непосредственным следствием этого “правила суммы” является то, что для направленного транспорта в общей Гамильтоновой системе необходимым требованием является смешанность фазового пространства (с сосуществующими регулярными и стохастическими регионами), так как в этом случае микроканоническое распределение является единственной инвариантной плотностью, к нему система всегда приближается в пределе большого времени. Таким образом, в этом подходе направленный транспорт имеет своим источником “неуравновешенные” токи в пределах островов регулярности.

Другое объяснение Гамильтоновых ратчетов основывается на баллистических потоках около границ стохастических слоев и регулярных островов, как было предложено Денисовым и др. [753, 754]. Оба эти объяснения в принципе являются правильными, но практическое применение ограничивает их рядом условий. Правило суммы ограничено случаем резонансов глубоко вложенных в стохастическое пространство (очень короткие потоки практически неразличимы от хаотической диффузии; сумма в правиле суммы быстро сходится), а баллистический поток – случаем строгих резонансов (длинные потоки, хорошо различимая на коротких временах хаотическая диффузия; легко получить соответствующие функции распределения вероятности).

В пределе быстро осциллирующей силы, средняя скорость частицы для уравнения (9.25) может быть приближенно вычислена при помощи разделения медленных и быстрых вкладов в траекторию $x(t)$ [741]. В частности, для симметричного потенциала подложки $V(x) = -\cos x$, но асимметричной силы

$$F(t) = A_1 \cos(\Omega t) + A_2 \cos(2\Omega t + \phi), \quad (9.28)$$

было найдено, что $\langle \dot{x} \rangle \propto (A_1^2 A_2 / \Omega^3) \sin \phi$. Использование периодической силы (9.28) приводит к *смешиванию* двух гармоник с частотами Ω и 2Ω в режиме *нелинейного ответа*. Заметим, что ток обнуляется если $A_1 = 0$ или $A_2 = 0$ или $\phi = 0, \pi$, когда существуют упоминаемые выше симметрии.

Возвращаясь обратно к уравнению (9.23) с $\eta > 0$, можно увидеть что только S_a -симметрия может выжить при ненулевом трении, и это может проявляться в нуле средней скорости из-за тех же самых соображений как выше. Наконец, описанные выше соображения симметрии показывают также путь как можно обратить ток ратчета (9.25). Первый метод состоит в использовании в этом уравнении $F(-t)$ вместо $F(t)$, в то время как второй метод, который также работает для системы с ненулевым трением η , состоит в совместном изменении потенциала $V(x) \rightarrow V(-x)$ и силы $F(t) \rightarrow -F(t)$.

Заметим, однако, что для малого η симметрия обращения времени может быть снова возвращена, то есть уравнение (9.28) будет выполняться приближенно. Таким образом, нули тока будут близки к $\phi = 0, \pi$. То же самое верно для суперсимметрии в сверхвязком случае, когда значение η является большим. Таким образом, даже когда симметрии формально нарушены, но система близка к пределу где они выполняются, изменение параметров, подобных относительной фазе ϕ , будет показывать частичное восстановление такой симметрии.

9.3 Солитонные ратчеты

Все описанные выше модели ратчетов должны также действовать для случая систем взаимодействующих атомов, например концепции ратчетов должны оставаться справедливыми для модели ФК, по крайней мере в пределе слабого взаимодействия $g \ll 1$. Более того, подобные концепции могут быть введены для случая сильно взаимодействующих атомов, когда основное состояние имеет только один кинк; последний может трактоваться как квазичастица, особенно в сверхвязком пределе. Однако, из-за взаимодействия появляются некоторые новые эффекты, например если мы учтем то что кинки являются ‘мягкими’ квазичастицами и управляющая сила может модифицировать их параметры. Мы заметим, что первое применение идей ратчета к солитонным системам было проведено Марчесони [755].

9.3.1 Условия симметрии

Описанные выше соображения симметрии для одночастичных ратчетов должны также работать и для коллективных ратчетов, так как нарушение симметрии не может быть восстановлено за счет дополнительных взаимодействий между атомами [741]. Например, Флах и др. [756] рассмотрели СГ ратчет качения

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \eta \frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + V'_{\text{sub}}(u) = F(t) + \delta F(x, t), \quad (9.29)$$

где $V_{\text{sub}}(u)$ – периодический потенциал с периодом $a_s = 2\pi$ имеющий минимумы при $u = la_s$, $F(t)$ – периодическая сила с периодом $\tau = 2\pi/\Omega$, а $\delta F(x, t)$ – гауссовский пространственно некоррелированный белый шум. Вводя плотность энергии $\rho(x, t) = \frac{1}{2} (u_t^2 + u_x^2) + V_{\text{sub}}(u)$, где индексы обозначают соответствующие частные производные, и используя уравнение непрерывности $\rho_t + j_x = 0$, мы получим для потока энергии $J(t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx j(x, t)$ следующее выражение (здесь мы предположили что $\eta = 0$), $J(t) = - \int_{-\infty}^{\infty} dx (\partial u / \partial t) (\partial u / \partial x)$. Можно видеть, что уравнение (9.29) является инвариантным относительно пространственной инверсии, $x \rightarrow -x$, в то время как ток J меняет свой знак при этом преобразовании. Таким образом, если топологический заряд Q решения $u(x, t)$ (где Q определяется как $Q = [u(-\infty, t) - u(\infty, t)] / a_s$) является нулевым, $Q = 0$, тогда усредненный по времени поток энергии для такого решения должен быть точно равен нулю, $\langle J(t) \rangle = 0$. С другой стороны, в случае когда система имеет ненулевое число геометрических кинков в силу граничных условий, $Q \neq 0$, ток будет исчезать только если *оба* потенциал подложки и сила являются симметричными, то есть если $V_{\text{sub}}(u)$ удовлетворяет условию (9.2), а $F(t)$ удовлетворяет условию (9.4). Действительно, в этом случае система характеризуется кинк-антикинковой симметрией (в силу гармоничности межчастичного взаимодействия в уравнении (9.29)) и поэтому она является инвариантной относительно комбинированного преобразования $x \rightarrow -x$ и $u \rightarrow -u + Qa_s$ не меняющего топологический заряд системы.

Аналитические и численные результаты основанные на теории коллективной координаты показывают [757] что, особенно в слабо затухающем пределе, необходимо учитывать внутреннюю (или профильную) моду кинка. Таким образом здесь проблему нельзя всегда свести к одночастичной задаче.

9.3.2 Ратчеты качения

Если нарушено любое из условий симметрии (симметрия отражения (9.2) потенциала подложки или сдвиговая симметрия (9.4) периодической силы), то следует ожидать ненулевого среднего тока (если нет ни какой другой скрытой симметрии). Например, для ко-синусоидального потенциала подложки и силы заданной уравнением (9.28), ток должен быть ненулевым если оба коэффициента A_1 и A_2 ненулевые и $\phi \neq 0$ или π . Численное моделирование проведенное Флахом с соавторами [756] (см. рис. 9.7) подтвердило, что эти предсказания является правильными даже для случая ненулевого трения (с убыванием η нули J будут приближаться к положениям $\phi = 0, \pi$). Более того, мы видим, что ток изменяет свой знак с изменением фазового сдвига ϕ , так что можно управлять направлением потока энергии за счет изменения ϕ .

Другой способ получить направленный транспорт кинков это нарушить симметрию отражения (9.2) потенциала подложки. Этот случай был рассмотрен Константины с соавторами [758]. Авторы изучили движение для модели (9.29) с пилообразным потенциалом подложки (9.1) и управляемой аддитивной чисто осциллирующей силой (9.21) при нулевой температуре ($\delta F(x, t) \equiv 0$). Было найдено, что в сверхвязком пределе средняя скорость кинка ведет себя как $\langle v_k \rangle \propto A^2$ [заметим, что при нулевой температуре направленное движение должно появляться выше некоторого порогового значения управляющей силы $A > A_0(\Omega)$]. Для объяснения такой зависимости, Константины с соавторами [758] заметили, что форма полного потенциала $V_{\text{eff}}(u) = V_{\text{sub}}(u) - uF(t)$ действующего на кинк, колеблется с частотой силы. В силу этого, так же должна вести себя и эффективная масса кинка, а амплитуда колебаний массы кинка $\delta m / m \propto A$ (заметим, что для симметричного потенциала подложки $\delta m / m \propto A^2$). Следовательно, в силу асимметрии пилообразного потенциала, кинк с положительной скоростью,

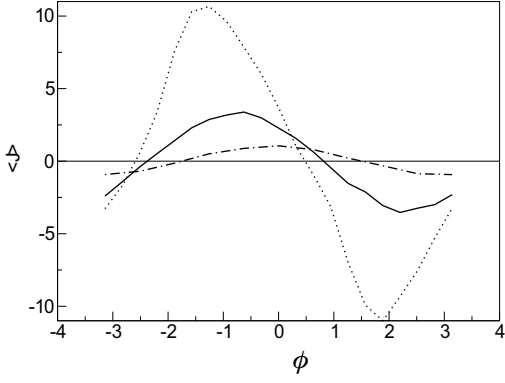


Рис. 9.7. Зависимость усредненного по времени значения тока энергии J от сдвига фазы ϕ для ратчета (9.28), (9.29) с одним кинком ($Q = 1$) и параметрами $A_1 = A_2 = 0.2$, $\Omega = 0.1$ и $k_B T = 0.01$. Точечная кривая дает зависимость для $\eta = 0.01$, сплошная кривая – для $\eta = 0.05$, а штрих-пунктирная кривая – для $\eta = 0.2$ (в последнем случае кривая была увеличена в пять раз для того чтобы сделать ее видимой) [756].

то есть для $F(t) > 0$, должен быть более массивным (и медленным) чем кинк с отрицательной скоростью; поэтому, в среднем мы будем иметь $\langle v_k \rangle \sim \langle \delta [F/\eta m(t)] \rangle \propto (A/\eta m^2) \delta m \propto A^2$.

В сверхвязком пределе, например для $\eta > 10$, моделирование показывает, что скорость кинка изменяется с изменением коэффициента трения η как $\langle v_k \rangle \propto \eta^{-5}$. Такая зависимость может быть объяснена как проявление неадиабатических эффектов из-за задержки отклика профиля кинка на частоту силы Ω , например, если $\delta m(\Omega)/\delta m(0) \sim [1 + (\eta\Omega)^2]^{-2}$. Когда трение убывает далее, скорость кинка достигает максимума (при $\eta \gtrsim 0.1$) и затем снова убывает как показано на рис. 9.8. Авторы связали этот эффект с релятивистской природой динамики кинка, которая следует из соотношения $\langle v_k \rangle \approx \langle v(t)/\sqrt{1 + [v(t)/c]^2} \rangle$ with $v(t) = F(t)/\eta m(t)$.

В пределе слабого трения $\eta \ll 1$ кривые рис. 9.8 приближаются к плато при уменьшении η ниже характерного значения имеющего порядок частоты Ω . Этот эффект был объяснен как следствие излучения фононов. Действительно, при экстремально малом η кинк будет достигать релятивистских скоростей при любой малой внешней силе. Тогда, релятивистское уменьшение ширины кинка будет приводить к сильному излучению фононов из-за появления эффектов дискретности, так что эффективный коэффициент трения $\eta_{\text{eff}} = \eta + \eta_{\text{ph}}$ для кинка становится почти независимым от η . При низком трении и достаточно высокой частоте нагрузки ($\Omega > 0.2$) солитонный ратчет обладает эффектом *обращения тока* (см. рис. 9.8 для случая $\Omega = 0.5$). Этот интересный эффект открывает путь для управления движением кинка при помощи периодической силы.

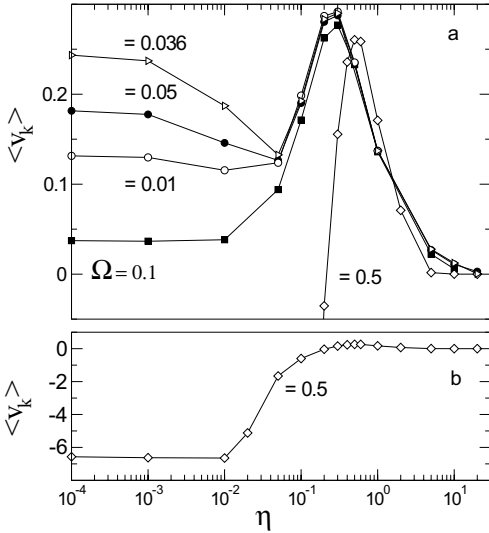


Рис. 9.8. Зависимость скорости кинка $\langle v_k \rangle$ от коэффициента трения η для пилообразного потенциала (9.1) и периодической силы с амплитудой $A = 0.3$ и различными значениями частоты Ω [758].

Наконец, зависимость скорости кинка от частоты силы Ω демонстрирует эффекты строгих резонансов – см. рис. 9.9. Для объяснения этого явления, заметим, что пилообразный потенциал (9.1) с параметрами $\mu = -1/4$ и $\varphi = \pi/2$ допускает существование профильной моды кинка с частотой $\omega_B \approx 0.8 \omega_{\text{min}} \approx 1.0562 < \omega_{\text{min}}$. Эта частота почти точно совпадает с резонансной частотой наблюдаемой при численном моделировании, $\Omega \approx \omega_B$. Напомним, что для СГ кинка, резонанс был найден при $\Omega \approx \omega_B/2$ (см. параграф 8.11).

Эта модель была также изучена Салерно и Квинтеро [759] с похожими численными результатами (хотя их интерпретация была другой: авторы утверждают что направленный транспорт появляется вследствие ненулевого трения η , которое смешивает *трансляционную* и *внутреннюю* (или *профильную*) моды кинка; однако, это противоречит результатам Костантини и др. [758], показанным на рис. 9.8). Салерно и Квинтеро [759]

показали также что ратчет поведение кинка является весьма устойчивым и сохраняется при $T > 0$. Наконец, заметим что эффективность такой ратчет машины является довольно низкой, направленный ток кинков вызванный осциллирующей силой даже не сопоставим с током возникающем при приложении постоянной силы той же амплитуды.

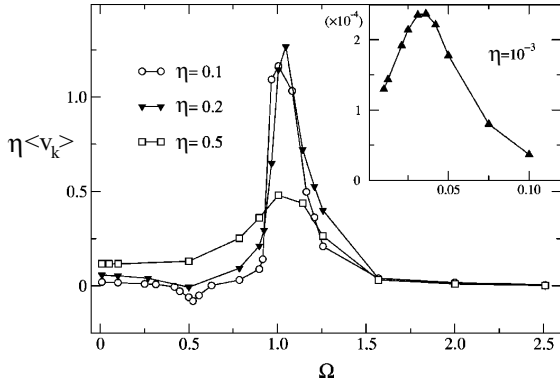


Рис. 9.9. Зависимость средней скорости кинка $\langle v_k \rangle$ (умноженной на η) от Ω при пилообразном потенциале (9.1) и различных значениях коэффициента трения η для периодической силы амплитуды $A = 0.3$. Вставка: случай экстремально малого трения $\eta = 10^{-3}$ в адиабатическом режиме малых Ω [758].

Когда нарушена симметрия отражения (9.2) подложки, тогда направленный транспорт кинка может достигаться исключительно за счет стохастической силы $\delta F(x, t)$, при условии что эта сила является *цветным* шумом, например, $\langle \delta F(x', t) \delta F(x, 0) \rangle = 2\eta k_B T \delta(x' - x) g(t)$, с коррелятором $g(t) \neq \delta(t)$ [755]. Действительно, давайте в невозмущенной системе (то есть в отсутствии внешней силы) форму кинка опишем функцией $u_k(x - X)$, где $X(t)$ – координата центра кинка. Напомним, что форма кинка зависит от формы потенциала подложки через уравнение (3.47) параграфа 3.3. Тогда, используя простой подход коллективной координаты (основанный на аргументах сохранения энергии) в нерелятивистском пределе (например, для сверхвязкого случая, $\eta \gg \omega_0$), Марчесони [755] показал что координата центра кинка удовлетворяет уравнению

$$m\ddot{X} + m\eta\dot{X} = F_g + \xi(t), \quad (9.30)$$

где m масса кинка, $\xi(t)$ – гауссовский шум, и чистая сила F_g задается уравнением

$$F_g = -2(k_B T / m) \int_0^\infty d\tau' g(\tau') h(\tau') \quad (9.31)$$

с

$$h(\tau') \approx \int_{-\infty}^\infty dx u_{k,x}(x, 0) u_{k,xx}(x, \tau'). \quad (9.32)$$

Можно проверить, что если симметрия системы восстановлена, или когда стохастическая сила соответствует белому шуму [для $g(t) = \delta(t)$ мы имеем $F_g \propto h(0) \propto u_{k,x}^2(x)|_{-\infty}^{+\infty} = 0$], или когда потенциал подложки является симметричным [для $V_{\text{sub}}(-u) = V_{\text{sub}}(u)$ мы имеем $h(\tau') = 0$ из-за $u_{k,x}(x, t) = u_{k,x}(-x, t)$ и $u_{k,xx}(x, t) = -u_{k,xx}(-x, t)$], тогда чистая сила будет равна нулю, $F_g = 0$. В любом другом случае, однако, в общем случае $F_g \neq 0$ и кинк дрейфует со средней скоростью $\langle \dot{X} \rangle = F_g / m\eta$ в направлении определяемом данным профилем потенциала $V_{\text{sub}}(x)$.

Для коррелированного шума с коррелятором $g(t) = (1/2\tau_c) e^{-|t|/\tau_c}$, мы можем найти что $F_g \propto \tau_c$ для $\tau_c \rightarrow 0$ (предел белого шума) и $F_g \propto \tau_c^{-1}$ для $\tau_c \rightarrow \infty$. Таким образом, существует оптимальное значение τ_c (которое зависит от конкретной формы потенциала подложки) при котором ток будет максимальным.

9.3.3 Пульсирующие ратчеты

Для системы взаимодействующих атомов с параметрическим управлением (9.13) появляется следующий новый эффект: как было показано Флория с соавторами [747], направленное движение может существовать исключительно из-за взаимодействия, то есть при $T = 0$. Механизм возникновения этого движения схематически показан на рис. 9.10 для просто ступенчатой силы, то есть когда $F(t)$ в уравнении (9.13) принимает значение $F(t) = -1$ (потенциал “выключен”) и $F(t) = 0$ (потенциал “включен”).

Как пример, Флория и др. [747] рассмотрели сверхвязкое детерминированное движение цепи в потенциале

$$U(\{u_i\}) = \sum_i \{[1 + F(t)] V(u_i) + V_{\text{int}}(u_{i+1} - u_i)\}, \quad (9.33)$$

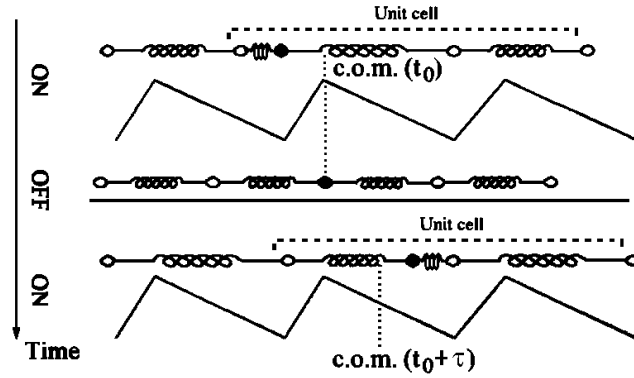


Рис. 9.10. Схематическое представление солитонного “on-off” пульсирующего ратчета работающего при нулевой температуре (сравните с $T > 0$ пульсирующим ратчетом на рис. 9.4). Коллективное взаимодействие между атомами производит чистый поток когда включается и выключается асимметричный потенциал подложки. Атомы в первую очередь ответственные за поток выделены цветом. Точечная линия обозначает центр массы элементарной ячейки (три атома на два периода потенциала) при t_0 и $t_0 + \tau$, показанный для того чтобы увидеть один цикл процесса [747].

где $V(x)$ имеет асимметричный профиль, а $V_{\text{int}}(x)$ – выпуклая функция (например, гармоническое взаимодействие $V_{\text{int}}(x) = \frac{1}{2}gx^2$). Эта модель при достаточно общих условиях позволяет провести строгий качественный и даже количественный анализ.

Действительно, пусть $V(x)$ – периодическая функция с периодом a_s и высотой K с одним максимумом и одним минимумом на период, максимум локализован при $x = 0$, а минимум – при $x = a^* = \frac{1}{2}a_s + ra_s$, где параметр r характеризует асимметрию пилообразного потенциала ($r = 0$ для симметричного потенциала подложки). Затем, пусть $F(t)$ будет периодической функцией с периодом $\tau = \tau_{\text{on}} + \tau_{\text{off}}$ (потенциал включен в течении времени τ_{on} и выключен в течении времени τ_{off}), и допустим, что времена $\tau_{\text{on}}, \tau_{\text{off}}$ являются достаточно большими для того чтобы цепочка успела достигнуть равновесного состояния. Согласно этим предположениям, состояние цепи будет однозначно определено и циклически упорядочено.

Когда потенциал выключен цепочка принимает равноудаленную конфигурацию $u_l = la_A + X_1$, где X_1 описывает положение центра масс, а a_A определяется из концентрацией атомов $\theta = a_s/a_A$ [или параметром соразмерности $w = a_A(\text{mod } a_s)$] для случая периодических граничных условий. Пусть момент времени t_0 соответствует концу полуцикла с выключенным потенциалом. В течении полуцикла с включенным потенциалом $t_0 < t < t_0 + \tau_{\text{on}}$ атомы будут двигаться к ближайшим минимумам потенциала подложки. Затем, в течении следующего полуцикла с выключенным потенциалом, цепочка снова принимает равноудаленную конфигурацию, но уже с координатой центра масс X_2 . Таким образом, цепочка сдвигается на расстояние $\Delta X = X_2 - X_1$, а величина тока $J = \Delta X/\tau$.

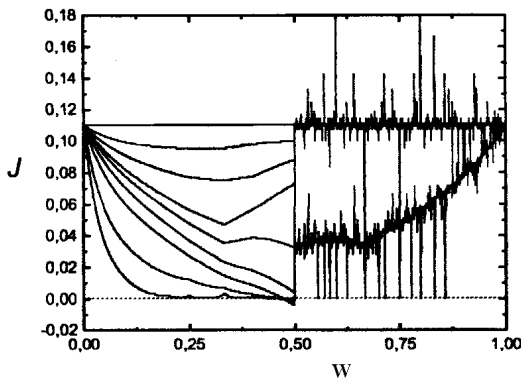


Рис. 9.11. Ток J/a_s как функция от параметра соразмерности w для асимметричного потенциала подложки с $r = 0.11$ и разными значениями K . Слева: $J(w)$ для иррационального w при, с веру вниз, $K = \infty, 6, 5, 4.5, 4, 3, 2, 1$ и 0.5 . Справа: несоизмеримые плотности для $K = \infty, 4$ [747].

Для *рациональных* значений плотности, $\theta = s/q$ (s и q – неприводимые целые числа), имеется хорошо определенное 1D отображение $X_{n+1} = \mathcal{M}(X_n)$ со следующими свойствами: (i) $\mathcal{M}$ является неубывающим (если $r > 0$), (ii) $\mathcal{M}$ является кусочно-периодическим, $\mathcal{M}(X + 1/s) = \mathcal{M}(X) + 1/s$, и (iii) $|\mathcal{M}(X) - X| \leq C < 1$. Асимптотически поток J задается выражением $J = \lim_{n \rightarrow \infty} [\mathcal{M}^n(X) - X]/n$, которое не зависит от начальных условий. В пределе очень сильного пининга, когда $K \rightarrow \infty$, конфигурация цепи в конце полуцикла с включенным потенциалом будет $u_l = a^* + a_s \text{int}(lw + \alpha)$, где $\text{int}(x)$ обозначает целую часть x , w –

параметр соразмерности, а α – произвольная фаза. Таким образом, отображение $\mathcal{M}(X)$ в этом пределе задается точно $\mathcal{M}(X) = [r + 1/(2s)] a_s$ для $0 \leq X < a_s/s$ [для других значений X можно использовать ступенчатую периодичность (ii)], а поток $J = (a_s/s) \text{int}(sr + 1/2)$. Для *иррационального* параметра соразмерности w , и несоразмерного предела мы будем иметь поток $J = ra_s$, который не зависит от w . Таким образом, несоразмерные структуры обладают эффектом коллективного ратчета в пределе строго пининга для любого асимметричного потенциала подложки ($r \neq 0$).

Результаты численных вычислений представлены на рис. 9.11. Как и ожидалось, при фиксированном w , поток убывает с K , так как промежуточные пинингованные структуры становятся менее асимметричными. Аналогично случаю сильного пининга, несоразмерный предел по-видимому, как показано на левой панели рис. 9.11, определяет непрерывную функцию $J(w)$. При соразмерном значении w поток показывает точку разрыва (правая панель рис. 9.11), а зависимость $J(w)$ имеет гребневидную форму.

9.4 Экспериментальные реализации

Одна из наиболее доступных реализаций солитонного ратчета была продемонстрирована с помощью джозефсоновских контактов. Напомним, что в этом случае JJ ток соответствует управляющей силе, а измеряемое напряжение – скорости кинка.

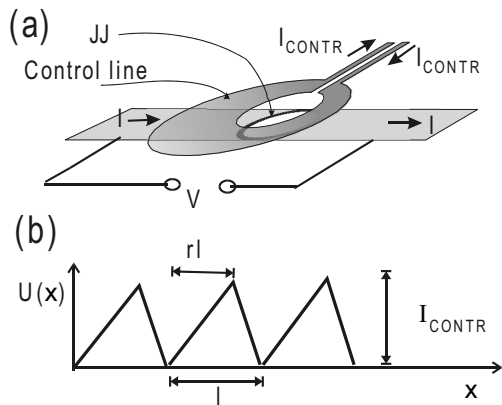


Рис. 9.12. (а) Длинный кольцевой джозефсоновский контакт с контролирующей линией генерирующей пилообразное магнитное поле. (б) Эффективный потенциал испытываемый флаксонном измеренный в контакте когда включен контролирующий ток [762].

Реализация одно-кинковой ратчет схемы, основанной на непрерывном одномерном длинном кольцевом джозефсоновском контакте была проведена Голдобиним и др. [760]. Эффективный ратчет потенциал для флаксона создается за счет приложения внешнего магнитного поля, специального выбора деформированной формы контакта, а также за счет смещения соответственно измененной “линии контроля” на верхнем контакте с целью модулирования проходящего через него магнитного потока, как показано на рис. 9.12 [761, 762]. Экспериментально измеренное напряжение для устройства этого типа показано на рис. 9.13. В зависимости от амплитуды осциллирующей силы $I_{a.c.}$, флаксон может пининговаться (область I на рис. 9.13), демонстрировать установившееся направленное движение (область II), или следовать за внешней силой при ее больших амплитудах (область III). Такой диодный эффект наблюдался также и для стохастической силы. Более того, когда температура убывает до $T = 4.2$ К, система переходит режим со слабым трением и наблюдается эффект “обращения тока” [763].

Позже Фало и соавторы [764] предложили для моделирования *дискретной* ФК цепи использовать параллельные последовательности джозефсоновских контактов с альтернативными критическими токами и областями контактов. В этой системе эффективный потенциал подложки для флаксона может быть выбран с пилообразным профилем. Триас с соавторами [765] экспериментально реализовали устройство такого типа.

Наконец, мы должны вспомнить реализацию схемы ратчета качения предложенную Ли с соавторами [766]. В этом случае ратчет потенциал возникает при помощи изменения толщины *сверхпроводящей пленки*, так что переменный ток приложенный к сверхпроводнику может индуцировать систематическое направленное *движение вихря*. Таким образом, за счет подходящего выбора ратчетного потенциала, может быть использована схема ратчета качения для подавления нежелательного захвата магнитного потока в тонких сверхпроводящих пленках. Количественные оценки показывают, что в этой модели тепловыми флуктуациями можно пренебречь.

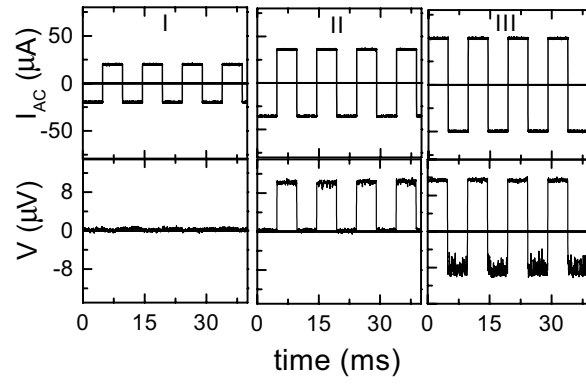


Рис. 9.13. Временные отметки осциллографа управляющего тока и измеренное напряжение для джозефсоновского контакта изображенного на рис. 9.12(a) с асимметричным ратчет потенциалом рис. 9.12(b) (параметр асимметрии $r = 0.62$) в адиабатическом режиме ($\Omega = 100$ Hz) для сильно демпфированной системы ($T = 6.5$ K) для амплитуды управляющего сигнала в трех областях: $I_{a.c.} < 25 \mu\text{A}$ (I), $I_{a.c.} \sim 35 \mu\text{A}$ (II), и $I_{a.c.} > 50 \mu\text{A}$ (III) [762].

Цепочки конечной длины

Для притягивающего межатомного потенциала притягивающий могут существовать устойчивые состояния конечных цепочек. Поэтому, важно изучить основное состояние и динамику таких цепочек конечной длины с фиксированным числом частиц. Задачи такого типа имеют приложения в поверхностной диффузии и физике атомных кластеров. Данная глава посвящена некоторым вопросам этой темы.

10.1 Общие замечания

Если межатомный потенциал $V_{\text{int}}(x)$ имеет притягивающую ветвь, то ФК цепочка *конечной длины*, то есть цепочка состоящая из N взаимодействующих атомов находящихся на потенциале подложки, может существовать в устойчивом состоянии. Для таких цепочек конечной длины возникают следующие вопросы:

1. Основное состояние модели. Этот вопрос является важным, например, в исследовании роста кристаллов;
2. Подвижность конечных цепочек. В частности, это интересно для изучения поверхностной диффузии адсорбированных кластеров.

Для стандартной ФК цепи с $V_{\text{int}}(x) = \frac{1}{2}g(x - a_{\text{min}})^2$ и $V_{\text{sub}}(x) = (1 - \cos x)$ система с конечной длиной характеризуется *тремя параметрами* N , g , и a_{min} (мы напомним что в наших системных единицах $m_a = 1$, $a_s = 2\pi$ и $\varepsilon_s = 2$). Изменение параметра a_{min} может быть ограничено интервалом $\pi \leq a \leq 2\pi$, так как потенциальная энергия (5.10) не меняется при изменении равновесного расстояния, $a_{\text{min}} \rightarrow \pm a_{\text{min}} + 2\pi$ и одновременном изменении положении атомов $x_l \rightarrow \pm x_l + 2\pi l$.

Введя относительные смещения u_l стандартным образом, $x_l = la_s + u_l$, мы получим уравнения движения конечной цепочки в форме,

$$\ddot{u}_1 + \sin u_1 - g(u_2 - u_1 - a_s P) = 0, \quad (10.1)$$

$$\ddot{u}_l + \sin u_l - g(u_{l+1} - 2u_l + u_{l-1}) = 0, \quad 2 \leq l \leq N-1, \quad (10.2)$$

$$\ddot{u}_N + \sin u_N + g(u_N - u_{N-1} - a_s P) = 0, \quad (10.3)$$

где $\dot{u} \equiv du/dt$, а параметр несоответствия $P \equiv (a_{\text{min}}/a_s - 1)$ рассматривается в пределах конечного интервала $-1/2 \leq P \leq 0$. Эти уравнения могут быть легко расширены для включения эффектов ангармонизма взаимодействия [767].

Новой особенностью, являющейся врожденным свойством конечной цепочки, является то, что она всегда пинингована. Энергия активации E_a для сдвига цепочки всегда больше нуля. Например, даже для цепочки жестко связанных атомов ($g = \infty$) значение E_a равно [176]

$$E_a = 2 \frac{|\sin(Na_{\text{min}}/2)|}{\sin(a_{\text{min}}/2)}, \quad (10.4)$$

так что оно равно нулю только для изолированных значений $a_{\text{min}} = a_n^\infty$, где

$$a_n^\infty = 2\pi - n(2\pi/N), \quad n = 1, 2, \dots, \text{int}(N/2). \quad (10.5)$$

Для нечетных значений N конечная цепочка обладает аналогом перехода Обри, когда минимальная частота частотного спектра колебаний становится равной нулю. Однако, скользящая (голдстоуновская) мода в конечной цепочке не существует.

10.2 Основные состояния и спектр возбуждений

10.2.1 Стационарные состояния

Конфигурации стационарного состояния цепочки соответствуют решениям системы уравнений (10.1)–(10.3), где мы для всех l должны положить $\ddot{u}_l = 0$. В общем случае эта система может быть решена только численно. Метод решения [768, 769] состоит из сведения системы (10.1) – (10.3) к единственному уравнению для одной переменной, скажем u_1 , которое затем решается численно в интервале $-\pi < u_1 \leq \pi$.

Для классификации различных стационарных решений $\{x_l^{(0)}\}$, необходимо сделать анализ нормальных мод, то есть найти собственные значения λ_n матрицы упругости $\mathbf{A} \equiv \{A_{ll'}\}$, $A_{ll'} = (\partial^2 H / \partial x_l \partial x_{l'})_{x_l=x_l^{(0)}}$,

$$\mathbf{A} \tilde{\mathbf{u}}^{(n)} = \lambda_n \tilde{\mathbf{u}}^{(n)}, \quad (10.6)$$

где $\tilde{\mathbf{u}}$ является N -мерным вектором, $\tilde{\mathbf{u}} = \{\tilde{u}_l\}$, а $\tilde{u}_l = x_l - x_l^{(0)}$ – смещения атомов из своих стационарных состояний. Симметричная матрица $\mathbf{A}$ может быть сведена к диагональной форме с помощью унитарной матрицы $\mathbf{T}$,

$$\mathbf{A} = \mathbf{T} \mathbf{B} \mathbf{T}^{-1}, \quad \mathbf{B} \equiv \{B_{mn}\}, \quad B_{mn} = \lambda_n \delta_{mn}, \quad (10.7)$$

$$\tilde{\mathbf{u}}^{(n)} = \mathbf{T} \mathbf{v}^{(n)}, \quad \mathbf{v}^{(n)} \equiv \{v_m^{(n)}\}, \quad v_m^{(n)} = v_n \delta_{mn}. \quad (10.8)$$

Тогда, вблизи стационарного состояния, полная потенциальная энергия цепочки U преобразуется к канонической форме

$$U \simeq E_{\text{GS}} \left(\{x_l^{(0)}\} \right) + \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \lambda_n v_n^2. \quad (10.9)$$

С физической точки зрения, интересны только следующие стационарные состояния: минимум потенциальной энергии ($\lambda_n > 0$ для всех n), и седловые точки с одним отрицательным собственным значением и с положительными остальными ($\lambda_1 < 0 < \lambda_2 < \dots < \lambda_N$). Соседние локальные минимумы всегда могут быть связаны седловой траекторией, то есть кривой которая проходит через седловую точку и определяется как решение следующей системы дифференциальных уравнений,

$$\frac{\partial x_l}{\partial \tau} = -\frac{\partial U}{\partial x_l}, \quad l = 1, 2, \dots, N, \quad (10.10)$$

где τ является параметром вдоль траектории. Седловая траектория является кривой наискорейшего спуска; в стационарных точках направление седловой траектории задается собственным вектором $\pm \tilde{\mathbf{u}}^{(1)}$ соответствующим минимальному собственному значению λ_1 .

Основным состоянием является стационарное состояние с наименьшей потенциальной энергией. Очевидно, основное состояние конечной ФК цепочки является бесконечно вырожденным, так как подстановка $x_l \rightarrow x_l + 2\pi$ преобразует одно основное состояние в другое соседнее состояние. Мы будем называть седловую траекторию связывающую соседние основные состояния системы “адиабатической” траекторией. Согласно Бергману с соавторами [146] каждое состояние системы на адиабатической траектории может быть связано с единственным параметром, координатой X , определенной как $X = \sum_{l=1}^N x_l$. Таким образом, потенциальная энергия системы описывается функцией

$$E(X) = U(\{x_l\})_{x_l \in \text{adiab. tr.}}, \quad (10.11)$$

которая периодична с периодом

$$b = 2\pi N. \quad (10.12)$$

Если два основных состояния могут быть связаны несколькими различными седловыми траекториями, то в качестве адиабатической траектории нужно взять траекторию с минимальным значением энергии активации E_a , определенной как

$$E_a = \max[E(X)] - \min[E(X)]. \quad (10.13)$$

При движении вдоль адиабатической траектории кинетическая энергия цепочки $K = \frac{1}{2} m_a \sum_{l=1}^N (\partial x_l / \partial t)^2$ принимает форму

$$K = \frac{m_a}{2} \sum_{l=1}^N \left(\frac{\partial x_l}{\partial X} \frac{\partial X}{\partial t} \right)^2 = \frac{m}{2} \left(\frac{\partial X}{\partial t} \right)^2, \quad (10.14)$$

где эффективная масса цепочки равна

$$m(X) = m_a \sum_{l=1}^N \left(\frac{\partial x_l}{\partial X} \right)^2. \quad (10.15)$$

Используя определение (10.15), легко показать что

$$m \simeq \begin{cases} 1 & \text{если } g \rightarrow 0, \\ 1/N & \text{если } g \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (10.16)$$

Наконец, можно показать [176] что вблизи стационарного состояния (состояние с энергетическим минимум или седловое состояние) с координатой X_s , потенциальная энергия системы может быть представлена в виде

$$E(X) \simeq E(X_s) \pm \frac{1}{2} m \omega_s^2 (X - X_s)^2, \quad (10.17)$$

где

$$\omega_s^2 = \pm \lambda_1 > 0. \quad (10.18)$$

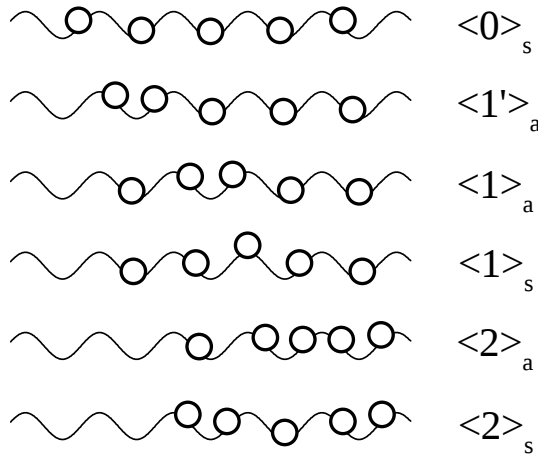


Рис. 10.1. Конфигурации стационарных состояний конечной ФК цепи с $N = 5$ [176].

В дальнейшем мы будем использовать следующие обозначения. Давайте пронумеруем минимумы внешнего потенциала таким образом, чтобы первый атом цепочки занимал потенциальную яму с номером 1, а последний (N -ый) атом, яму с номером M . Тогда, мы можем обозначить различные стационарные состояния системы целым $n = N - M$ и дополнительно индексом “ s ” для симметричного или “ a ” для асимметричного состояний (см. рис. 10.1). Более того, чтобы различить состояния соответствующие локальным минимумам потенциальной энергии от седловых состояний, мы будем выделять первые нижним подчеркиванием ($\langle \underline{n} \rangle$), а последние верхним подчеркиванием ($\langle \bar{n} \rangle$). Очевидно, при $a_{\min} = 2\pi$ состояние $\langle \underline{0} \rangle_s$ всегда соответствует основному состоянию. При уменьшении параметра $a_{\min}$ конфигурация ОС изменяется по следующей последовательности,

$$\langle \underline{0} \rangle_s \rightarrow \langle \underline{1} \rangle \rightarrow \langle \underline{2} \rangle \rightarrow \dots \rightarrow \langle \underline{n^*} \rangle, \quad (10.19)$$

где

$$n^* = \text{int} \left[\frac{(N-1)}{2} \right]. \quad (10.20)$$

10.2.2 Континуальное приближение

Если $g \gg 1$ и $N \gg 1$, мы можем использовать континуальное приближение $la_s \rightarrow x$, $u_l \rightarrow u(x)$, в котором уравнения (10.1)–(10.3) сводятся к уравнению маятника

$$\frac{d^2 u}{d\tilde{x}^2} = \sin u, \quad (10.21)$$

где $\tilde{x} = x/d$ и $d = a_s \sqrt{g}$. Периодическое решение уравнения (10.21) имеет форму [см. уравнение (1.21)]

$$u(\tilde{x}) = \pi + 2 \sin^{-1} \text{sn}(-\sigma(\tilde{x} - \beta)/k, k), \quad (10.22)$$

где $\sigma = -\text{sign}P$, а модуль $0 < k \leq 1$. Напомним что уравнение (10.22) описывает регулярную последовательность кинков (если $\sigma = +1$) или антикинков (при $\sigma = -1$) ширины $d_{\text{eff}} = kd$ отделенными друг от друга на расстояние R ,

$$R = d \, 2k\mathbf{K}(k) \quad (10.23)$$

(в безразмерных единицах $\tilde{d} = 1$ и $\tilde{R} = 2k\mathbf{K}(k)$). В дальнейшем мы предполагаем что точка $\tilde{x} = 0$ является центром цепочки.

Для конечной цепочки длины $L = Na_s$ решение (10.22) может быть охарактеризовано целым n ,

$$n = \text{int}(L/R), \quad (10.24)$$

которое равно числу кинков в конечной цепочке. В наших обозначениях это состояние обозначается как $\langle n \rangle$. Из соображений симметрии следует, что для нечетных n , $n = 1, 3, \dots$, решение должно описывать состояние с кинком расположенным в центре цепочки, так что мы должны положить в уравнении (10.22) $\beta = 0$. Иначе, для четных n , $n = 0, 2, \dots$, мы должны взять $\beta = k\mathbf{K}(k)$, так что в центре цепочки плотность избыточных атомов $\rho(x) = -(1/a_s)du/dx$ имеет свой минимум.

Модуль k в уравнении (10.22) должен определен граничными условиями свободных концов, $du/d\tilde{x}|_{\tilde{x}=\pm\frac{1}{2}\tilde{L}} = Pd$ [см. уравнение (5.106) в параграфе 5.3.1], которое теперь приводит к соотношению

$$\text{dn}\left(\frac{\tilde{L}}{2k}, k\right) = \begin{cases} 2\sqrt{1-k^2}/k|P|d & \text{если } n = 0, 2, \dots, \\ \frac{1}{2}k|P|d & \text{если } n = 1, 3, \dots \end{cases} \quad (10.25)$$

Из уравнения (10.25) следует что k должно лежать в интервале

$$\left[1 + \left(\frac{1}{2}Pd\right)^2\right]^{-1/2} < k < \min\left[1, \left(\frac{1}{2}|P|d\right)^{-1}\right]. \quad (10.26)$$

Следовательно, для данных значений L , g , и $a_{\min}$ уравнение (10.25) имеет решения для конечного набора значений k , $k = k_n$, где $n_{\min} < n < n_{\max}$ [770]. Все решения соответствуют метастабильным и неустойчивым конфигурациям кроме одного, с $n_{(GS)}$ и $k_n^{(GS)}$, соответствующего основному состоянию и обеспечивающему минимум потенциальной энергии конечной цепочки.

Изменяя конфигурацию ОС с увеличением параметра несоответствия $|P|$ при фиксированных значениях L и g схематически показана на рис. 10.2. Очевидно, что при $P = 0$ состояние $\langle 0 \rangle$ с $k^{(GS)} = 1$ является ОС [см. рис. 10.2(a)]. При увеличении $|P|$ структура основного состояния изменяется проходя последовательно через конфигурации $\langle 0 \rangle \rightarrow \langle 1 \rangle \rightarrow \dots \rightarrow \langle n^* \rangle$. Такое поведение может быть качественно объяснено следующим образом. Давайте проинтерпретируем свободный конец цепочки как “обрыв” кинка [771], и вспомним что кинки отражаются друг от друга. Когда $|P|$ увеличивается от нуля до значения P_1 ($P_1 > P_{FM}$, $P_1 \rightarrow P_{FM} \equiv 2/\pi^2\sqrt{g}$ как $N \rightarrow \infty$), энергия состояния $\langle 0 \rangle$ увеличивается из-за их отталкивания от свободных концов, см. рис. 10.2(b). При $|P| = P_1$ энергия рождения дополнительного кинка ε_k становится равной нулю и при $P_1 < |P| < P_2$ (где уже $\varepsilon_k < 0$) состояние с одним кинком будет ОС, так как появление второго кинка является энергетически невыгодным из-за отталкивания кинков [см. рисунки 10.2(c) и 10.2(d)]. С дальнейшим увеличением $|P|$ в интервале $P_2 < |P| < P_3$ основным состоянием становится состояние с двумя кинками [см. рис. 10.2(e)] и так далее до состояния $\langle n^* \rangle$. Значение P_n , соответствующее переходу от ОС $\langle n-1 \rangle$ к ОС $\langle n \rangle$, может быть определено из условия $nR = L$, которое приводит к соотношению [176]

$$(P_n d)^2 \left(|P_n| - \frac{n}{N}\right)^{1/2} = \left(\frac{n}{2N}\right)^{1/2} \quad (10.27)$$

которое, однако, остается верным только при $|P|d \gg 1$.

Использованная выше кинковая терминология является полезной пока кинк может быть “вставлен” в цепочку, то есть когда $g \ll g^*$, где значение g^* определяется из условия $2d = L$, так что

$$g^* = \frac{1}{4}N^2. \quad (10.28)$$

С другой стороны, то есть при $g \gg g^*$, цепочка может быть рассмотрена как цепочка жестко связанных атомов.

10.2.3 Дискретная цепочка

Дискретная ФК цепочка может быть исследована только численно [176, 768, 772, 773] за исключением простейших случаев $N = 2$ и $N = 3$ [176]. Многие описанные выше в континуальном приближении качественные свойства

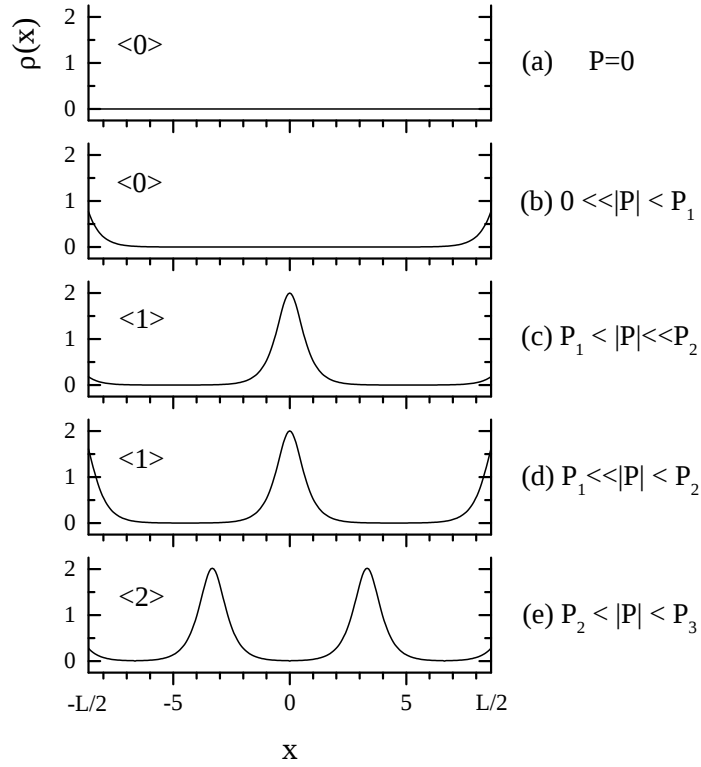


Рис. 10.2. Плотность лишних атомов $\rho(x) = -u_x(x)/a_s$ в ОС конечной цепочки для фиксированного g и L и разных значениях несоответствия P из интервала $-1/2 < P \leq 0$.

сохраняются также и для дискретной цепочки, по крайней мере для достаточно больших значений параметра g . Новое свойство появляющееся в дискретной цепочке – это существование внутреннего пининга обусловленного ПН потенциалом. В результате этого конечная ФК цепочка всегда закреплена, энергия $E_a > 0$ для любого $g \neq \infty$, из-за пининга свободных концов цепи [458].

Когда N четно или когда N нечетно, но четно n , конфигурация ОС симметрична (например, см. конфигурации $\langle 0 \rangle_s$ и $\langle 2 \rangle_s$ на рис. 10.1). Более сложным является случай когда оба числа N и n являются нечетными. В этом случае ОС будет симметричным для достаточно больших значений $g > g_A$, а конфигурация $\langle n \rangle_s$ имеет кинк точно на середине цепочки. Этот кинк находится на вершине ПН потенциала из-за отталкивания от свободных концов (если $n = 1$) или от других кинков (если $n = 3, 5, \dots$). В этом случае средний атом находится в верхнем положении (см. конфигурацию $\langle 1 \rangle_s$ на рис. 10.1). Когда межатомное взаимодействие становится ниже критического значения g_A , отталкивания кинков становится уже не достаточно для сохранения верхней конфигурации и энергия цепочки понижается за счет ухода центрального атома от максимума $V_{\text{sub}}(x)$. Таким образом, состояние $\langle n \rangle_s$ становится неустойчивым (седловым) состоянием, в то время как новое ОС становится асимметричным и двукратно вырожденным (например, состояние $\langle 1 \rangle_a$ на рис. 10.1). Этот разрушающий симметрию переход может быть интерпретирован как “конечный-Обри” переход нарушения аналитичности [490].

Кроме основного состояния, имеются метастабильные конфигурации, число которых увеличивается приблизительно линейно с ростом длины цепочки, то есть плотность конфигурационных возбуждений остается приблизительно постоянной [490]. Число метастабильных состояний существенно увеличивается при $g < g_A$. Компьютерное моделирование показывает, что разность энергии на один атом между ОС и высоко-энергетическим метастабильным состоянием является почти постоянной. Среднее межчастичное расстояние a_A в метастабильных конфигурациях занимает область значений ниже и выше значения ОС, интервал допустимых значений a_A сжимается к нулю при $g \rightarrow \infty$.

10.2.4 Спектр колебаний

Каждая устойчивая конфигурация $\langle n \rangle$ имеет собственный спектр линейных возбуждений, которые состоят из N частот соответствующих собственным значениям λ_j уравнения (10.6),

$$\omega_j^2 = \lambda_j, \quad j = 1, 2, \dots, N. \quad (10.29)$$

Этот спектр может быть объяснен с помощью подхода газа квазичастиц. Первое, он состоит из $(N-n)$ фононных частот, которые находятся в фононной зоне $(\omega_0, \omega_{\max})$. Заметим, однако, что две из этих мод отщепляются от дна фононной зоны и преобразуются в локализованные “концевые” (или “поверхностные”) моды с частотами отделенными щелью от фононной ветви [771].

Когда $n \neq 0$, то n мод далеко удалены от фононной зоны и преобразуются в n голдстоуновских (или ПН для дискретной цепочки) кинковых мод. Из-за взаимодействия между кинками, эти моды образуют свой частотный спектр. Напомним что в бесконечной цепочке с несоразмерным основным состоянием кинковые коллективные моды образуют спектр с акустическим законом дисперсии [см. уравнение (5.74)],

$$\omega(\kappa) = c_s \kappa, \quad (10.30)$$

где $\kappa \leq \pi a_s / R$, R – среднее расстояние между кинками, а c_s определяется из уравнения (5.75). Для конечной цепочки этот спектр состоит из n дискретных частот, а волновой вектор κ в уравнении (10.30) ограничен снизу размером цепочки, $\kappa \geq \pi a_s / L$. Следовательно, коллективные кинковые моды имеют минимальное значение частоты $\omega_G \simeq c_s \pi a_s / L$. Более аккуратное вычисление дает выражение [770]

$$\omega_G \simeq \frac{\sqrt{1-k^2}}{k} \operatorname{sn} \left(\frac{\pi \sqrt{g}}{N} \frac{k \mathbf{K}(k)}{\mathbf{E}(k)}, k \right). \quad (10.31)$$

Для устойчивой конфигурации частота наименьшей колебательной моды ω_G всегда положительна кроме случая, когда конфигурация становится неустойчивой с изменением параметров модели. Например, при “конечном Обри” переходе с уменьшением g в точке $g = g_A$ конфигурация ОС $\langle \mathbf{n} \rangle_s$ расщепляется на три конфигурации: на седловую конфигурацию $\langle \mathbf{n} \rangle_s$ и две новые конфигурации ОС $\langle \mathbf{n} \rangle_{a,\text{left}}$ и $\langle \mathbf{n} \rangle_{a,\text{right}}$, которые зеркально отражают друг друга. Ясно, что в точке $g = g_A$ щель в колебательном спектре исчезает, и цепочка будет иметь мягкую моду ($\omega_G = 0$) соответствующую неустойчивости цепочки [490]. Как было показано Брейманом и др. [774, 775], вблизи перехода минимальная частота ведет себя как

$$\omega_G \propto |g - g_A|^{1/2}. \quad (10.32)$$

При малом g дискретная ФК цепь имеет “хаотические” конфигурационные возбуждения — метастабильные состояния со случайно закрепленными кинками. Как было показано Мартини с соавторами [771], колебательный спектр этих состояний является приближенно непрерывным.

Кроме линейных возбуждений, бесконечная ФК цепочка имеет существенно нелинейные возбуждения (бризеры). Вспомним что в дискретной ФК цепочке эти возбуждения имеют конечное время жизни обусловленное затуханием из-за излучения (см. главу 4). Подобные возбуждения существуют также и в конечной ФК цепочке, но теперь они появляются только когда энергия возбуждения превышает некоторое пороговое значение ε_c , где $\varepsilon_c \rightarrow 0$ когда $N \rightarrow \infty$ [776]. Интересным нелинейным возбуждением, специфическим для конечной цепочки, является “концевая” нелинейная мода [777, 778], которая может быть представлена как половина бризера, центр которого сохраняется на конце цепи. Это возбуждение описывает колебание кинка близи конца цепи, такое что при каждом отражении от свободного конца, кинк преобразуется в антикин, затем снова в кинк, и т.д. В случае $P = 0$ нелинейная концевая в континуальном приближении описывается уравнением [777]

$$u(\tilde{x}, t) = 4 \tan^{-1} \left[\left(\frac{\kappa}{k'} \right)^{1/2} \operatorname{sn}(\beta \tau, \kappa) \operatorname{dn}(\alpha \tilde{x}, k) \right], \quad (10.33)$$

где τ – безразмерное время, $k' = \sqrt{1-k^2}$, $\alpha = [1 + (k')^2 + (k'/\kappa)(1 + \kappa^2)]^{-1/2}$, $\beta = \alpha(k'/\kappa)^{1/2}$, параметр κ определяется длиной цепочки из равенства $\tilde{L} = \mathbf{K}(k)/\alpha$, а модуль k определяет частоту концевой моды

$$\omega = \pi \alpha \sqrt{k'} [2\sqrt{\kappa} \mathbf{K}(\kappa)]^{-1}. \quad (10.34)$$

Мода (10.33) существует пока энергия возбуждения ε лежит в интервале $\varepsilon_c < \varepsilon < \varepsilon'_c$, где

$$\varepsilon_c = \pi E_k / 2\tilde{L}, \quad (10.35)$$

$$\varepsilon'_c = E_k \mathbf{E}(\lambda) \mathbf{K}(\lambda) / \tilde{L}, \quad (10.36)$$

энергия кинка $E_k = 8\sqrt{g}$, а параметр λ определяется из уравнения

$$\mathbf{K}(\lambda) (1 + \sqrt{1-\lambda^2}) = \tilde{L}. \quad (10.37)$$

При $\tilde{L} \gg 1$ энергия $\varepsilon'_c \simeq E_k (1 - 4e^{-\tilde{L}}) \simeq E_k$. Условие $\varepsilon < \varepsilon'_c$ следует из требования что амплитуда кинковых колебаний не должна превосходить половину длины цепочки.

10.3 Динамика конечной цепочки

10.3.1 Гусенично-подобное движение

Когда энергия возбуждения ε превосходит вторую пороговую энергию ε'_c , две нелинейные концевые моды (10.33) частично перекрываются на середине цепочки и преобразуются в одну объединенную моду [777]

$$u(\tilde{x}, \tau) = 4 \tan^{-1} \left[(\kappa'/\kappa')^{1/2} \operatorname{dn}(\alpha\tilde{x}, k) \operatorname{sn}(\beta\tau, \kappa) / \operatorname{cn}(\beta\tau, \kappa) \right], \quad (10.38)$$

где теперь $\alpha = [(1 - k'/\kappa')(1 - k'\kappa')]^{-1/2}$, $\beta = \alpha(k'/\kappa')^{1/2}$, а параметры κ и k определяются из соотношений $\tilde{L} = \mathbf{K}(k)/\alpha$ и $\varepsilon = E_k \mathbf{E}(k)\alpha$. Решение (10.38) описывает колебание кинка между двумя свободными концами с частотой

$$\omega = \pi \alpha (k'/\kappa')^{1/2} / \mathbf{K}(\kappa). \quad (10.39)$$

При каждом отражении кинка от свободного конца, кинк преобразуется в антикинк и конечный атом сдвигается направо на значение $2a_s$. Так что, для одного периода $T = 2\pi/\omega$ движения кинка вдоль цепочки, кинк бежит направо, отражается от правого свободного конца и преобразуется в антикинк, затем антикинк бежит на лево и отражается от левого свободного конца преобразуясь опять в кинк, затем он снова бежит направо, и т.д. В течение этого цикла цепочка как одно целое протягивается вправо на расстояние $2a_s$. Таким образом, цепочка двигается со средней скоростью

$$v = 2a_s/T = a_s\omega/\pi. \quad (10.40)$$

Это движение похоже на ползущую гусеницу. Подобное движение было обнаружено Стояновым [779] при компьютерном моделировании и для предела слабого взаимодействия стандартной модели ФК было изучено Брейманом с соавторами [780, 781]. Было показано также, что столкновение кинка с свободным концом цепочки сопровождается сильным излучением, поэтому отражение кинка наблюдается для достаточно жестких цепочек с $g \geq 1$, в то время как в случае слабого межатомного взаимодействия $g < 1$ кинк исчезает когда достигает конца цепочки.

В наших обозначениях гусеничное движение происходит вдоль траектории

$$\dots \rightarrow \langle 0 \rangle \rightarrow \langle 1 \rangle \rightarrow \langle 0 \rangle \rightarrow \langle -1 \rangle \rightarrow \langle 0 \rangle \rightarrow \langle 1 \rangle \rightarrow \dots \quad (10.41)$$

Заметим, что это движение происходит в специальном случае $g \gg 1$ и $P = 0$, когда можно пренебречь ПН рельефом и торможением движения кинка, а также равны друг другу энергии рождения кинка и антикинка. Для общего случая гусеничное движение происходит вдоль траектории

$$\dots \rightarrow \langle n \rangle \rightarrow \langle n+1 \rangle \rightarrow \langle n \rangle \rightarrow \langle n-1 \rangle \rightarrow \langle n \rangle \rightarrow \langle n+1 \rangle \rightarrow \dots \quad (10.42)$$

и может быть описано подобным способом за исключением того, что кинк (антикинк) заменяется суперкинком (супер-антикинком). Заметим также что гусеничное движение требует пороговой (активационной) энергии E_a , которая приблизительно равна энергии рождения кинка (суперкинка) E_k (или E_{sk}).

10.3.2 Адиабатические траектории

Адиабатическая траектория связывает одно основное состояние $\langle n \rangle$ с координатой X_i и соседнее ОС с $X_f = X_i + b$ и проходит через седловые и метастабильные состояния $\langle n+1 \rangle$ или $\langle n-1 \rangle$ в зависимости от того какая из траекторий требует меньшую энергию активации. В предельных случаях $g = 0$ и $g = \infty$ вычисление характеристик этой траектории тривиально [176]. Здесь мы опишем результаты численного изучения для произвольного N и $0 < g < \infty$ [772, 773, 176].

Напомним, что основное состояние $\langle 0 \rangle_s$ должно быть трансформировано в состояния $\langle 1 \rangle, \langle 2 \rangle, \dots, \langle n^* \rangle$ где параметр $a_{\min}$ уменьшается. Следовательно, мы можем определить области $O_0, O_1, \dots, O_{n^*}$ на плоскости параметров $(a_{\min}, g)$ такие, что в области O_n состояние $\langle n \rangle$ является основным. Например, при $N = 4$ область O_0 (с основным состоянием $\langle 0 \rangle_s$) состоит из областей а-с на рис. 10.3, а область O_1 (с основным состоянием $\langle 1 \rangle_s$) включает области d-i. Области O_{n-1} и O_n отделены кривой $[a_n]$ (см. кривую $[a_1]$ на рис. 10.3), где значение a_n является равным тому значению $a_{\min}$, которое удовлетворяет уравнению $E(\langle n-1 \rangle) = E(\langle n \rangle)$, так что область O_n определяется неравенствами $a_{n+1} < a_{\min} < a_n$. Кривая $[a_1]$ определяется ФвдМ пределом,

$$g_{[a_1]} \simeq \begin{cases} (a_{\min} - \pi)/2\pi & \text{если } g \ll 1, \\ (4/\pi)^2/(2\pi - a_{\min})^2 & \text{если } g \gg 1, \end{cases} \quad (10.43)$$

в то время как кривые $[a_n]$ при $n \geq 2$ определяются уравнением (10.27) для $g \gg 1$ и сходятся к кривой (10.43) для $g \ll 1$, так как для малых g энергия отталкивания кинков экспоненциально мала.

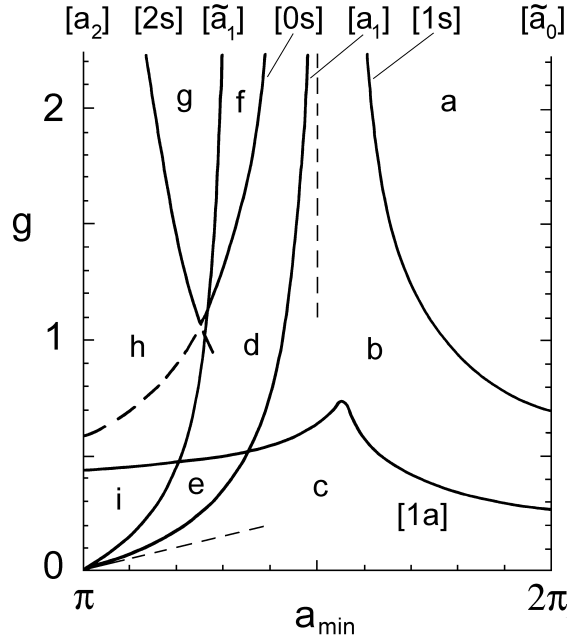


Рис. 10.3. Плоскость параметров системы $(a_{\min}, g)$ для ФК цепочки с $N = 4$. Определение кривых дано в тексте. Буквы a–i обозначают области с различными адиабатическими траекториями: (a) $\langle 0 \rangle_s \rightarrow \langle \bar{1} \rangle_s \rightarrow \langle 0 \rangle_s$, (b) $\langle 0 \rangle_s \rightarrow \langle \bar{x} \rangle \rightarrow \langle 1 \rangle_s \rightarrow \langle \bar{x} \rangle \rightarrow \langle 0 \rangle_s$, (c) $\langle 0 \rangle_s \rightarrow \langle \bar{x}' \rangle \rightarrow \langle 1 \rangle_a \rightarrow \langle \bar{x}'' \rangle \rightarrow \langle 1 \rangle_s \rightarrow \langle \bar{x}'' \rangle \rightarrow \dots$, (d) $\langle 1 \rangle_s \rightarrow \langle \bar{x} \rangle \rightarrow \langle 0 \rangle_s \rightarrow \langle \bar{x} \rangle \rightarrow \langle 1 \rangle_s$, (e) $\langle 1 \rangle_s \rightarrow \langle \bar{x}' \rangle \rightarrow \langle 1 \rangle_a \rightarrow \langle \bar{x}'' \rangle \rightarrow \langle 0 \rangle_s \rightarrow \langle \bar{x}'' \rangle \rightarrow \dots$, (f) $\langle 1 \rangle_s \rightarrow \langle \bar{0} \rangle_s \rightarrow \langle 1 \rangle_s$, (g) $\langle 1 \rangle_s \rightarrow \langle \bar{2} \rangle_s \rightarrow \langle 1 \rangle_s$, (h) $\langle 1 \rangle_s \rightarrow \langle \bar{x} \rangle \rightarrow \langle 2 \rangle_s \rightarrow \langle \bar{x} \rangle \rightarrow \langle 1 \rangle_s$, (i) $\langle 1 \rangle_s \rightarrow \langle \bar{x}' \rangle \rightarrow \langle 1 \rangle_a \rightarrow \langle \bar{x}'' \rangle \rightarrow \langle 2 \rangle_s \rightarrow \langle \bar{x}'' \rangle \rightarrow \dots$

Каждая область O_n в свою очередь разделена кривой $[\tilde{a}_n]$ (см. кривую $[\tilde{a}_1]$ на рис. 10.3) на две подобласти, на одну “правую” подобласть O_n^- ($\tilde{a}_n < a_{\min} < a_n$), где движение происходит по траектории

$$\langle n \rangle \rightarrow \langle n-1 \rangle \rightarrow \langle n \rangle, \quad (10.44)$$

и “левую” подобласть O_n^+ ($a_{n+1} < a_{\min} < \tilde{a}_n$), где адиабатическая траектория проходит через состояние $\langle n+1 \rangle$

$$\langle n \rangle \rightarrow \langle n+1 \rangle \rightarrow \langle n \rangle. \quad (10.45)$$

Для $N = 4$ область O_n^- на рис. 10.3 включает подобласти d–f, а область O_1^+ состоит из подобластей g–i. Согласно определению адиабатической траектории, кривая $[\tilde{a}_n]$ определяется условием равенства энергии активации двух траекторий, уравнение (10.44) и уравнение (10.45). Заметим что прямая линия $a_{\min} = 2\pi$ соответствует кривой $[\tilde{a}_0]$, а прямая линия $a_{\min} = \pi$ совпадает с кривой $[a_{n+1}]$ для четных N и с кривой $[\tilde{a}_n^*]$ для нечетных N .

В области O_0 имеется кривая $[1s]$ (см. рис. 10.3) справа от которой (то есть при $a_{[1s]} < a_{\min} < 2\pi$) состояние $\langle 1 \rangle_s$ является седловым, а слева состояние $\langle 1 \rangle_s$ соответствует локальному минимуму энергии системы. Аналогично, в каждой области O_n^- (O_n^+) имеется такая же кривая $[(n-1)s]$ (или $[(n+1)s]$), слева (справа) от которой состояние $\langle n-1 \rangle_s$ (или $\langle n+1 \rangle_s$), и справа (слева) от которой существует состояние $\langle n-1 \rangle_s$ (или $\langle n-1 \rangle_s$) (см. на рис. 10.3 кривую $[0s]$ в области O_1^- , и кривую $[2s]$ в области O_1^+). В частности, кривая $[0s]$ определяется из метастабильного ФвдМ предела P_{ms} [см. уравнение (5.109) параграфа 5.3.1]

$$g_{[0s]} \simeq 4/(2\pi - a_{\min})^2 \quad \text{if } g \gg 1. \quad (10.46)$$

Наконец, на рис. 10.3 изображена кривая $[1a]$, ниже которой появляется дополнительное стационарное состояние $\langle 1 \rangle_a$. Это состояние соответствует локальному минимуму энергии системы (более строго, состояние $\langle x \rangle$ расщепляется на три состояния: $\langle \bar{x}' \rangle$, $\langle 1_a \rangle$, и $\langle \bar{x}'' \rangle$). Как правило, существуют кривые $[na]$ ($n = 1, 2, \dots, \text{int}[(N-1)/2]$) ниже которых существуют стационарные состояния $\langle n \rangle_a$; в случае нечетных N , эти кривые сливаются с кривыми $[ns]$ так как $a_{\min} \rightarrow a_n^\infty$ [176]. Для нечетного N это расщепление соответствует описанному выше “конечному” переходу Обри.

Адиабатическое движение цепочки может быть описано теперь следующим образом [176, 770, 772, 773]. Для соразмерного случая $a_{\min} = 2\pi$, в начале движения кинк вводится в цепочку с левого конца цепи, затем этот кинк движется вдоль цепочки направо и аннигилирует на правом конце. Согласно работе Ковалева [777], рождение кинка на свободном конце полу-бесконечной цепочки (с координатой $y = 0$) и его последующее движение направо

может быть качественно рассмотрено как рождение кинк-антикинк-пары в точке $y = 0$ бесконечной цепочки и их последующее движение в противоположных направлениях (кинк идет на право, $y_k = y$, а антикинк – налево, $y_{\bar{k}} = -y$). Следовательно, энергия системы с одним кинком может быть переписана в виде

$$V(x) \simeq \varepsilon_k - \frac{1}{2}v_{\text{int}}(2y) - \frac{1}{2}v_{\text{int}}(4\pi N - 2y), \quad (10.47)$$

где последние два члена могут быть интерпретированы как энергия притяжения кинка к двум свободным концам цепочки. Таким образом, потенциальная энергия адиабатического движения цепочки $E(X)$ можно приближенно представить выражением

$$E(X) = V(X) + V_{PN}(X), \quad (10.48)$$

где второй член описывает движение кинка вдоль цепочки в периодическом потенциале Пейерлса-Набарро $V_{PN}(X) \simeq \frac{1}{2}\varepsilon_{PN}(1 - \cos X)$. В случае $g \rightarrow 0$ мы имеем $\varepsilon_{PN} \rightarrow 2$ и $\varepsilon_k \rightarrow 0$, а функция $E(X)$ имеет $(N - 1)$ локальных минимумов. При увеличении g энергия $\varepsilon_{PN} \rightarrow 0$, в то время как энергия ε_k возрастает до своего насыщения при $g \geq g^*$. В то же самое время локальные минимумы функции $E(X)$ исчезают, вначале (при $g \leq 1$, когда $2d \simeq 2\pi$) два минимума, самые близкие к концам цепочки, затем минимумы более удаленные от концов и т.д. Наконец, когда $g \geq g^*$ кинк не может быть “вставлен” в цепочку, функция $E(X)$ имеет только один максимум для состояния $\langle \bar{1} \rangle_s$ и “солитонная” терминология становится неприемлемой.

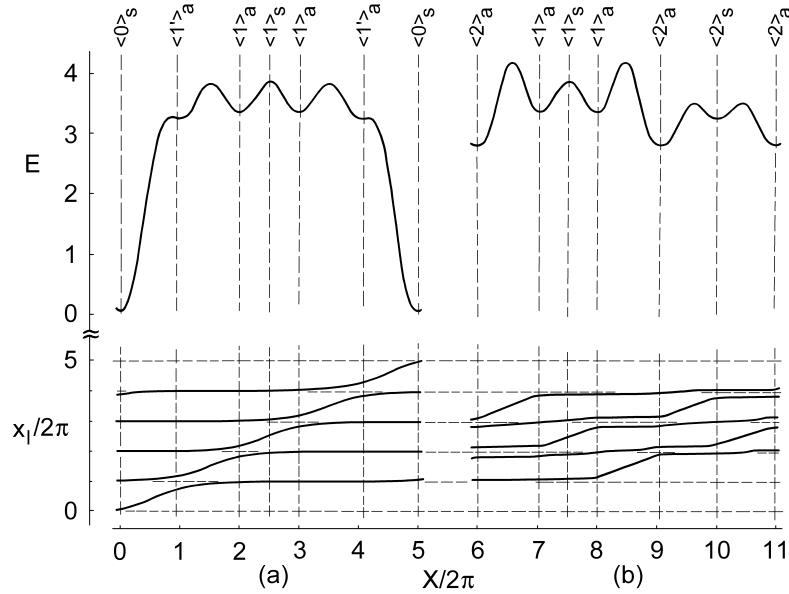


Рис. 10.4. Траектории адиабатического движения пяти-атомной ФК цепочки с параметрами системы: $g = 0.3$ и (a) $a_{\min} = 1.90\pi$, и (b) $a_{\min} = 1.01\pi$ [176].

В общем случае $a_{\min} \neq 2\pi$ с основным состоянием $\langle n \rangle$ ($n \neq 0$), адиабатическое движение (10.45) может быть рассмотрено как рождение лишнего кинка на левом конце цепочки, и затем, после некоторого числа смещений, происходит аннигиляция самого правого кинка на правом конце цепочки (см. рис. 10.4a). Для траектории (10.44) с промежуточным состоянием $\langle n - 1 \rangle$ последовательность событий обращается: вначале, самый правый кинк покидает цепочку и затем новый кинк рождается на левом конце цепочки (см. рис. 10.4b). С другой стороны, поведение системы при $a_{\min} \neq 2\pi$ качественно подобно описанному выше. Заметим, что это движение можно также интерпретировать как “рождение” $\rightarrow$ “движения вдоль цепочки” $\rightarrow$ “аннигиляция” лишнего суперкинка или супер-антикинка. Следовательно, энергия активации движения цепочки можно приближенно представить как

$$E_a \simeq \Delta\varepsilon_n(a_{\min}, g) + \varepsilon_{PN}(g), \quad (10.49)$$

где

$$\Delta\varepsilon_n = \min \{ |E(\langle n + 1 \rangle) - E(\langle n \rangle)|, |E(\langle n - 1 \rangle) - E(\langle n \rangle)| \} \quad (10.50)$$

приближенно равна энергии рождения суперкинка или супер-антикинка в зависимости от того какая из этих двух энергий меньше.

Таким образом, функция $E_a(a_{\min})$ достигает своих максимумов при соразмерном случае ($a_{\min} = 2\pi$), имеет локальные максимумы при $a_{\min} = \tilde{a}_n$ и локальные минимумы при $a_{\min} = a_n$ (см. рис. 10.5). Вблизи кривых

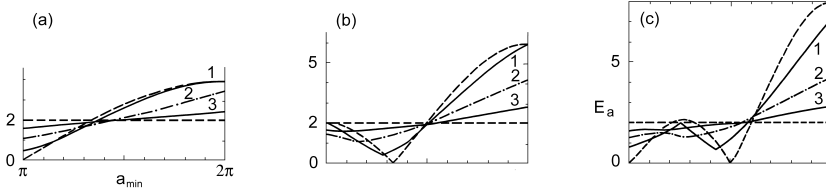


Рис. 10.5. Зависимость энергии активации E_a от параметра $a_{\min}$ для (a) $N = 2$, (b) $N = 3$, и (c) $N = 4$. Пунктирные кривые соответствуют значениям $g = \infty$ и $g = 0$, в то время как сплошные кривые – значениям $g = 1$ (кривая 1) и $g = 0.1$ (кривая 3), а штрих-пунктирные кривые – значениям $g = 1/\pi$ для $N = 2$, и $g = 0.3$ для $N = 3$ и $N = 4$ [176].

$[a_n]$ имеются области на плоскости параметров $(a_{\min}, g)$ (см. заштрихованные области на рис. 10.6) где энергия активации движения цепочки меньше энергии активации движения изолированного атома. Заметим, что при фиксированном значении g функция $E_a(a_{\min})$ слабо зависит от длины цепочки N при выполнении неравенства $2d \ll L$ [то есть если $N \gg N^*$, где значение N^* определяется из уравнения (10.28), $N^* = 2\sqrt{g}$]. В частности, при $g \ll 1$ зависимость $E_a(a_{\min})$ имеет форму

$$E_a \simeq 2 + \pi g(a_{\min} - 3\pi/2) \quad (10.51)$$

для любого значения $N \geq 2$ [176].

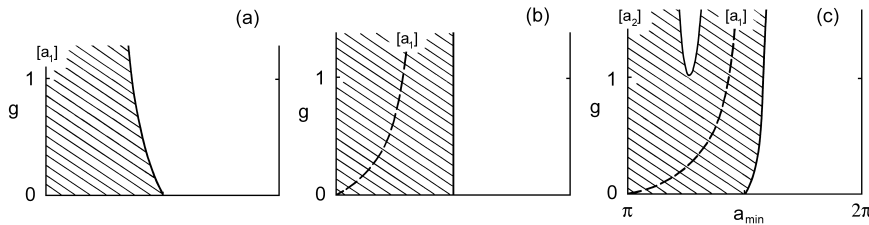


Рис. 10.6. Плоскость параметров $(a_{\min}, g)$ для (a) $N = 2$, (b) $N = 3$, и (c) $N = 4$. Заштрихованные регионы показывают области где энергия активации для адиабатического движения N -атомной меньше энергии активации движения единственного атома [176].

Описанный “кинк-прыжковый” механизм движения цепочки вдоль адиабатической траектории был реализован в сильно демпфированном случае, когда энергетический обмен цепочки с подложкой является сильным. В противоположном слабо демпфированном случае, когда внешнее трение очень мало или совсем отсутствует, а внутреннее трение является достаточно малым (как имеет место при $g \gg 1$ и $N \gg 1$), “гусеничная” траектория (10.42) в силу эффектов инерции может быть более предпочтительной, так в фазовом пространстве она является более прямой. Энергия активации этой траектории определяется уравнением (10.49), где теперь $\Delta\epsilon_n$ равна максимальному значению энергий ϵ_{sk} и $\epsilon_{sk'}$. Таким образом “гусеничное” движение более предпочтительно для случая $a_{\min} = \tilde{a}_n$. Заметим также, что если цепочка движется с конечной скоростью v , то *динамический потенциал Пайерлса-Набаро* будет отличаться от адиабатического потенциала, так как скорости $v \geq b\omega_n$ атомов цепочки не будут иметь времени для реакции подгонки на потенциал подложки, что эквивалентно эффективному уменьшению амплитуды внешнего потенциала.

10.3.3 Диффузия коротких цепочек

Для применения модели к конкретным физическим системам, нужно учесть энергетический обмен между различными степенями свободы ФК цепочки и обмен между цепочкой и подложкой. Феноменологически, этот обмен приводит к трению с некоторым коэффициентом η , который характеризует интенсивность энергетического обмена. Таким образом, движение цепочки может быть приближенно описано уравнением Ланжевена

$$m\ddot{X} + m\eta\dot{X} + dE(X)/dX = \delta F(t), \quad (10.52)$$

где m задается уравнением (10.15), а стохастическая сила δF удовлетворяет флуктуационно-диссипативной теореме, $\langle \delta F(X, t) \delta F(X, t') \rangle = 2\eta(X)m(X)k_B T \delta(t-t')$. Для времен $t > \eta^{-1}$ решение уравнения Ланжевена (10.52) соответствует диффузионному движению системы с коэффициентом диффузии

$$D = Rb^2, \quad R = R_0 \exp(-E_a/k_B T), \quad (10.53)$$

где R – скорость выхода системы из дна потенциальной ямы $E(X)$. Пренебрегая сложной формой функции $E(X)$ (а именно, игнорируя существование локальных минимумов), энергию $E(X)$ можно описать потенциалом Пейрара-Ремуасне [186]

$$E(X) \simeq \frac{1}{2} E_a V_{\text{PR}} \left(\frac{2\pi X}{b} \right), \quad V_{\text{PR}}(y) = \frac{(1-r)^2 - (1 - \cos y)}{(1+r^2 + 2r \cos y)}, \quad (10.54)$$

где r параметр ($|r| < 1$). Тогда собственные частоты $\tilde{\omega}_0$ [на минимуме потенциала $E(X)$] и $\tilde{\omega}_s$ (на седловой точке), $\tilde{\omega}_{0,s}^2 = \pm m_{0,s}^{-1} E''(X)_{X=0,b/2}$, связаны следующим соотношением,

$$m_0 \tilde{\omega}_0^2 m_s \tilde{\omega}_s^2 = (E_a/2N^2)^2. \quad (10.55)$$

Исключая экзотический случай чрезвычайно низкого трения, предэкспоненциальный коэффициент R_0 для потенциала (10.54) может быть определен в соответствии с теорией Крамера

$$R_0 \approx \begin{cases} \tilde{\omega}_0/2\pi & \text{если } \eta \leq \tilde{\omega}_s, \\ \tilde{\omega}_0 \tilde{\omega}_s / 2\pi\eta & \text{если } \eta > \tilde{\omega}_s. \end{cases} \quad (10.56)$$

Используя уравнения (10.53), (10.55) и (10.56), мы получим выражение для коэффициента диффузии,

$$D = D_0 \exp(-E_a/k_B T), \quad (10.57)$$

где

$$D_0 \simeq \begin{cases} 2\pi N^2 \tilde{\omega}_0 & \text{если } \eta \leq \tilde{\omega}_s, \\ \pi E_a / \eta \sqrt{m_0 m_s} & \text{если } \eta > \tilde{\omega}_s. \end{cases} \quad (10.58)$$

Если потенциал (10.54) имеет форму глубоких узких ям разделенных широкими барьерами (то есть если $r < 0$), то мы можем приближенно взять $E_a \simeq \frac{1}{2} m_0 \tilde{\omega}_0^2 \pi^2$, так что получаются следующие оценки для значения D_0

$$D_0 \simeq \begin{cases} 2\pi N^2 \tilde{\omega}_0 & \text{if } N < N^{**}, \\ 2\pi \tilde{\omega}_0^2 / \eta & \text{if } N > N^{**}, \end{cases} \quad (10.59)$$

где

$$N^{**} = (\tilde{\omega}_0 / \eta)^{1/2}. \quad (10.60)$$

Таким образом, для соразмерного случая ($a_{\min} = 2\pi$) при фиксированном значении g , энергия активация E_a (до насыщения при $N \geq N^*$) и предэкспонентный множитель D_0 (до насыщения при $N \geq N^{**}$) оба увеличиваются с увеличением длины N . С другой стороны, при фиксированных значениях N и g множители E_a , $\tilde{\omega}_0$, и D_0 меняются “в фазе” если меняется равновесное расстояние $a_{\min}$. Таким образом, в обоих случаях теория предсказывает существование эффекта “компенсации”, когда значения E_a и D_0 меняются одновременно в том же направлении. Коэффициент диффузии D может либо возрасть или убывать с увеличением длины цепочки N (первое происходит при $a_{\min} \simeq \tilde{a}_n$, а последнее при $a_{\min} \simeq a_n$). Приведенная выше феноменологическая теория была использована Брауном [176] для описания диффузии малых кластеров адсорбированных на поверхностях кристалла.

10.3.4 Стимулированная диффузия

Подвижность конечной ФК цепочки может быть существенно увеличена при помощи применения внешнего периодического по времени поля с подходящим выбором частоты [770]. Многообещающим кандидатом является частота ω_G , уравнение (10.31), наименьшая частота в акустической ветви коллективного движения кинков. При этой частоте все кинки колеблются с одной фазой. Внешнее управление будет увеличивать энергию цепочки, делая более вероятным переход из ОС в метастабильные состояния. Но метастабильное состояние имеет собственный спектр колебаний, который отличается от спектра ОС, и резонансы нарушаются. После проведения некоторого времени в метастабильном состоянии система возвращается в ОС, где она снова оказывается в резонансе с внешним полем. Так внешнее поле с “резонансной” частотой стимулирует цепочку к “колебаниям” между ОС и соседними метастабильными состояниями и вызывает ее движение вдоль подложки. Моделирование динамики [770] подтверждает существование подвижности “обусловленной резонансами”: периодическое по времени внешнее поле частоты ω_G и малой амплитуды (10^{-3} в наших безразмерных единицах) существенно увеличивает случайные блуждания цепочки. Важно, что изменяя частоту возбуждающего поля можно менять размер кластера, демонстрирующего стимулируемую подвижность, так как частота ω_G зависит от N .

10.4 Случай невыпуклого потенциала

Реалистические парные межатомные потенциалы, такие как потенциал Морзе (5.138), имеют конечную энергию диссоциации, то есть их притягивающая ветвь стремится к нулю с увеличением межатомного расстояния. В параграфе 5.4.3 было показано, что ФК модель с потенциалом Морзе имеет две особенности по сравнению со стандартной моделью ФК. Во-первых, нарушается симметрия между кинком (локальным сжатием цепочки) и антикинком (локальным растяжением). По сравнению с кинком, антикинк характеризуется меньшим значением ε_k и большими значениями ε_{PN} и m . В результате этого, кривые $[a_n]$ и $[\tilde{a}_n]$ на плоскости параметров $(a_{\min}, g)$ будут сдвинуты. Например, при $a_{\min} = 2\pi$ траектория $\langle 0 \rangle \rightarrow \langle -1 \rangle \rightarrow \langle 0 \rangle$ будет иметь меньшую энергию активации чем траектория $\langle 0 \rangle \rightarrow \langle +1 \rangle \rightarrow \langle 0 \rangle$. Второе, для потенциала (5.138) межатомная сила притяжения достигает максимума при расстоянии $x = a_{\inf}$. За точкой перегиба $a_{\inf}$ потенциал $V_{\text{int}}(x)$ становится вогнутым и сила уменьшается с увеличением расстояния между атомами. В результате этого, существует бесконечное число метастабильных состояний, соответствующих цепочке разорванной на две, три, ..., N частей (или даже на единичные атомы). Напомним, что при отрицательном несоответствии $P \leq P_{\inf} < 0$ [то есть для $a_{\inf} \leq a_s$, см. уравнение (5.146)], свободные концевые части ФК цепочки с потенциалом Морзе всегда искажаются, независимо от значения энергии связи $V_{\min}$ потенциала Морзе (5.138). В результате, предел метастабильности P_{ms}^- , выше которого цепочка без кинка (то есть состояние $\langle 0 \rangle$) не может существовать как метастабильная конфигурация, исчезает при условии что минимум $V_{\min}$ является достаточно низким (на рис. 10.3 этот эффект будет проявляться как разрыв кривой $[0s]$ при достаточно малом g). Кроме того, при $P < P_{\inf}$ и достаточно большом $V_{\min}$, средняя часть цепочки тоже искажается. Ясно, что ФК цепочка конечной длины должна вести себя аналогично.

Напомним также, что бесконечная цепочка с фиксированной плотностью не может существовать в основном состоянии $\langle 0 \rangle$ (то есть без кинков) при условии $P \leq P_{FM}^-$ (или $a_{\min} \leq a_{FM}^-$), так как она будет разрываться на две полубесконечные части. Аналогичная ситуация может появляться для конечной ФК цепочки в метастабильном состоянии $\langle 0 \rangle$ когда фиксированы ее концы, например, из-за пининга на примесях. Однако, разрыв конечной цепочки N атомов имеет место при условии $a_{\min} \leq a_{FM}^- - \delta a(N)$, где $\delta a(N)$ может быть оценено как $\delta a(N) \simeq (a_{\inf} - a_{\min})/N$.

Описанный эффект является достаточно важным в росте эпитаксиальных слоев с $a_{FM}^- - \delta a(N_0) < a_{\min} < a_{FM}^-$. На начальной стадии роста, возникают коротко расширенные “острова” размера $N < N_0$ находящиеся в состояниях когерентных с подложкой. Но с увеличением островов, происходящем за счет присоединения еще атомов, состояние $\langle 0 \rangle$ становится метастабильным когда $N > N_0$, так что оно должно трансформироваться либо в точное ОС с равномерно распределенными дислокациями (кинками), либо в метастабильное состояние, разрываясь на более короткие цепочки, в зависимости от того какой из этих процессов требует меньшей энергии активации [512, 513].

Другой интересный эффект, предсказанный Милчевым и Марковым [262], состоит в том, что мигрирующие за счет тепловых колебаний кластеры могут разрушаться на более мелкие фракции если они проходят конфигурации с ненормально растянутыми связями. Таким образом, подложка может действовать как “фильтр”. При индуцированной тепловыми колебаниями миграции будут выживать только кластеры чьи размеры меньше некоторой критической величины, в то время как остальные кластеры будут распадаться на малые фракции.

Двухмерные модели

Одно из важных обобщений классической модели ФК связано с выходом за рамки ее одномерной природы. В частности, двухмерная ФК модель описывает плоскую решетку взаимодействующих атомов при наличии внешнего периодического потенциала, который может быть или одномерным или двухмерным. В этой главе обсуждаются некоторые задачи связанные с двухмерной моделью ФК.

11.1 Предварительные замечания

В общем случае более высокой размерности, модель ФК описывает решетку взаимодействующих атомов помещенную на многомерном периодический потенциал. Даже двухмерный случай является достаточно сложным. Одним из важных новых особенностей двухмерной (2D) модели является то, что теперь не только основное состояние при $T = 0$, но также равновесные состояния при $T \neq 0$ могут демонстрировать множество различных фаз и фазовых переходов между ними. Не вдаваясь в подробности ниже мы обсудим существование двух возможных равновесных фаз в 2D решетке.

При отсутствии потенциала подложки, $V_{\text{sub}}(x, y) \equiv 0$, точная кристаллическая структура в 2D системе невозможна, и система неупорядоченна при любой $T \neq 0$ [516], [782]–[784]. Но при достаточно низких температурах $T < T_{cr}$, равновесное состояние системы характеризуется квазидальным порядком (известным как “алгебраический” порядок), соответствующая фаза называется *плавающий кристалл* [785]–[788]. В этой фазе, при увеличении расстояния трансляционная корреляционная функция убывает по степенному закону (вместо экспоненциального закона в жидкой фазе). Плавающая фаза имеет сдвиговую жесткость. Кроме того, в этой фазе ориентационный порядок (то есть, ориентации связей между ближайшими соседями) является удаленно-упорядоченным как в обычных кристаллах [786]. Ясно, что при высоких температурах $T > T_{cf}$ система должна быть полностью неупорядоченной, так что обе (трансляционная и ориентационная) корреляционные функции должны убывать согласно экспоненциальному закону. Плавающая фаза “расплавляется” при помощи хорошо известного дислокационного механизма Костерлица-Таулеса [789]–[791]. Переход из “плавающей фазы” в “жидкую фазу” происходит в два шага [792]. Вначале, при $T \geq T_{cr}$, разрушается дальний квазипорядок из-за образования ядер дислокационных пар (то есть, пар состоящих из двух дислокаций с противоположными векторами Бюргерса) и их последующей диссоциацией. Одновременно, ориентационный дальний порядок преобразуется в ориентационный квазидальний порядок. Затем, при $T \geq T_{cf}$ ориентационный квазидальний порядок разрушается из-за рождения дисклинационных пар. Эти фазовые переходы непрерывны. Промежуточная фаза при $T_{cr} < T < T_{cf}$ называется гексагональной жидкокристаллической фазой. Эти особенности были обнаружены, в частности, при моделировании методом молекулярной динамики системы атомов отталкивающихся друг от друга согласно закону Кулона [793]. Заметим также, что случайные неравновесные (“замороженные”) примеси разрушают плавающую фазу [794, 795].

В противоположном предельном случае, когда потенциал подложки существенно превосходит межатомные взаимодействия, система может быть рассмотрена в рамках модели решеточного газа. В этом случае, система демонстрирует разнообразие структур включая кристаллические (соразмерные), плавающие (несоразмерные), и жидкие (полностью неупорядоченные) фазы зависящие от симметрии подложки, закона взаимодействия, концентрации θ и температуры T , а соответствующие фазовые переходы с изменением θ или T могут быть как непрерывными (первого рода), так и разрывными (второго рода). В некоторых частных случаях модель допускает точное решение (например модели Изинга, Бакстера и Потса), а в остальных случаях она может быть изучена различными методами включая моделирование Монте-Карло, низко- и высоко-температурные ряды, метод конечномерной трансфер-матрицы и т.д. Описание свойств модели решеточного газа с коротко действующими взаимодействиями может быть найдено в обзорах Селка и др. [796, 797] (см. также книгу [48]; случай дальнедействующего анизотропного диполь-дипольного взаимодействия был изучен в работах [798, 799]).

В общем случае, 2D модель ФК находится между двумя этими случаями. Очевидно, что мы не можем дать полное описание всех задач двумерной динамики, нашей целью является только обзор нескольких работ посвященных двумерным моделям ФК. Модель ФК можно обобщить до двухмерных версий двумя различными способами приводящими к скалярным и векторным ФК моделям. В *скалярных моделях* атомы упорядочены в двумерную структуру, но движение атомов остается одномерным. Скалярная модель может быть использована, в частности, для описания слоя атомов адсорбированного на бороздчатой поверхности, такой как плоскость (112) of b.c.c. кристалла. Так как энергетический барьер для движения поперек борозд намного выше чем для движения вдоль борозд, можно предположить что адсорбированные атомы могут двигаться только вдоль каналов. Однако, взаимодействием между атомами в различных каналах в общем случае нельзя пренебречь. Естественный путь изучения скалярной модели это рассмотреть его как систему связанных одномерных ФК цепочек. Тогда, взаимодействие между цепочками будет приводить к взаимодействию между топологическими возбуждениями (кинками) разных цепочек. Если взаимодействие является притягивающим, кинки будут упорядочиваться в доменные стенки (ДС), так что такая конфигурация может быть рассмотрена как “вторичная” ФК цепочка перпендикулярно ориентированная к “первичным” цепям. Этот подход описан в параграфе 11.2.

В более детальной модели мы должны позволить атомам двигаться более чем в одном измерении. Простейшей моделью этого класса является ФК модель с поперечной степенью свободы [800]. В этой модели атомы остаются упорядоченными в одномерную цепочку, но потенциал подложки является двухмерным, он периодичен в одном (продольном) направлении и параболичен в другом (поперечном) направлении, а атомы могут двигаться в обоих направлениях. В физических системах поперечная степень свободы может соответствовать, например, движению адсорбируемых атомов перпендикулярно поверхности, или их смещениям ортогонально бороздкам в случае адсорбции на изборожденной кристаллической плоскости. Новые интересные аспекты в поведение модели появляются при отталкивающем межатомном взаимодействии. А именно, когда величина отталкивания становится (или уменьшается кривизна поперечного потенциала) больше определенного порогового значения, то прямолинейная конфигурация атомов в ОС становится неустойчивой и система переходит в новое “зигзагообразное” ОС. В свою очередь, это полностью изменяет спектр возбуждений модели, в результате появляются кинки различных типов, изменяется сценарий перехода Обри, и т.д. *Зигзагообразная* модель ФК описана в параграфе 11.3.

Наконец, параграфы 11.4 и 11.5 посвящены точно двумерным *векторным* моделям ФК, где атомы могут двигаться в двух измерениях, а потенциал подложки также является периодическим в двух измерениях. Векторные модели демонстрируют богатый спектр поведения, включая особенности скалярных и зигзагообразных моделей.

11.2 Скалярные модели

В первом, более простом обобщении модели ФК, мы можем оставить скалярную природу полевой переменной u связанной со смещениями атомов, но позволить атомам формировать двумерный массив. Таким образом, теперь смещения u_{l_x, l_y} будут пронумерованы целыми числами l_x и l_y , которые описывают положение атома в двумерном массиве. Кинетическая энергия K и энергия потенциала подложки U_{sub} остаются практически теми же как и в 1D модели,

$$K = \frac{1}{2} \sum_{l_x, l_y} \dot{u}_{l_x, l_y}^2, \quad U_{\text{sub}} = \frac{\varepsilon_s}{2} \sum_{l_x, l_y} (1 - \cos u_{l_x, l_y}). \quad (11.1)$$

Что касается межатомного взаимодействия, прямое обобщение стандартной модели ФК приводит к форме

$$U_{\text{int}} = \sum_{l_x, l_y} \left[\frac{g_x}{2} (u_{l_x+1, l_y} - u_{l_x, l_y} - a_{sx} P_x)^2 + \frac{g_y}{2} (u_{l_x, l_y+1} - u_{l_x, l_y} - a_{sy} P_y)^2 \right], \quad (11.2)$$

где g_x и g_y постоянные упругости, a_{sx} и a_{sy} постоянные решетки, а P_x и P_y являются параметрами несовпадения в направлениях x и y . Если $g_x = g_y$ и $a_{sx} = a_{sy}$, модель является изотропной, в другом случае мы приходим к анизотропной двумерной модели ФК. В континуальном пределе задача (11.1) – (11.2) сводится к двумерному уравнению СГ $\ddot{u} - \Delta u + \sin u = 0$ которое, к сожалению, не является точно интегрируемым.

Однако, приближение “шарики и пружинки” (11.2) для межатомного взаимодействия является строгим только если относительные смещения атомов в ближайших соседних цепях является малым по сравнению с a_s . Более реалистическая модель была предложена Брауном и др. [46]. Давайте назовем изолированную ФК цепь “ x -цепью”. Транспорт массы вдоль x -цепи осуществляется кинками (x -кинками), которые характеризуются шириной d_0 , массой m_0 , энергией покоя ε_{k0} и барьером Пайерлса-Набарро ε_{PN0} (индекс “0” соответствует

изолированной x -цепи). Взаимодействие атомов принадлежащих соседним x -цепям, приводит к взаимодействию между цепями. Пусть $v(\Delta x)$ является энергией двух атомов которые принадлежат ближайшим соседним (БС) цепям и сдвинуты относительно друг друга вдоль цепи на расстояние Δx . Пусть $u_1(x)$ и $u_2(x)$ являются смещениями атомов в различных цепях из своих положений равновесия соответствующей соразмерной 2D структуры. Простейшее выражение для энергии взаимодействия между цепями в континуальном приближении имеет следующий вид

$$U'_{\text{int}} = \frac{\alpha}{2} \int \frac{dx}{a_{sx}} [u_1(x) - u_2(x)]^2, \quad (11.3)$$

где α является соответствующей постоянной упругости. Выражение (11.3), однако, не учитывает следующие два важных обстоятельства. Первое, энергия должна оставаться той же самой если одну цепочку, которая не имеет кинков, сдвинуть на один период соразмерной структуры. Следовательно, уравнение (11.3) должно быть модифицировано как

$$U'_{\text{int}} = \alpha \int \frac{dx}{a_{sx}} \{1 - \cos [u_1(x) - u_2(x)]\}, \quad (11.4)$$

напомним, что $a_{sx} = 2\pi$. Второе, оба уравнения (11.3) и (11.4) не описывают взаимодействие между двумя цепями находящихся в тождественных, но неоднородных состояниях, то есть когда $u_1(x) = u_2(x) \neq 0$. Напомним, что плотность “избыточных” атомов в неоднородном состоянии равна $\rho(x) = -u'(x)/a_{sx}$, энергия их взаимодействия может быть описана выражением

$$U''_{\text{int}} = \iint \frac{dx dx'}{a_{sx}^2} u'_1(x) v(x - x') u'_2(x'). \quad (11.5)$$

Если потенциал $v(x)$ является коротко-действующим на шкале d_0 , мы можем проаппроксимировать его как $v(x) \approx \gamma a_{sx} \delta(x)$. Комбинируя уравнения (11.4) и (11.5), мы в конце приходим к выражению

$$U_{\text{int}}[u_1, u_2] = a_{sx}^{-1} \int dx \{ \alpha [1 - \cos(u_1(x) - u_2(x))] + \gamma u'_1(x) u'_2(x) \}, \quad (11.6)$$

где параметры α и γ связаны с потенциалом $v(x)$ соотношениями

$$\alpha = \left. \frac{\partial^2 v(x)}{\partial x^2} \right|_{x=0}, \quad \gamma = \int \frac{dx}{a_{sx}} v(x). \quad (11.7)$$

Теперь мы можем рассмотреть систему параллельных ФК цепей. Она описывается гамильтонианом

$$\mathcal{H} = \sum_j \{ H[u_j] + U_{\text{int}}[u_j, u_{j+1}] \}, \quad (11.8)$$

где индекс j нумерует цепочку, H – гамильтониан изолированной цепочки, а парное межцепное взаимодействие описывается уравнением (11.6). Давайте рассмотрим систему с фиксированной плотностью и предположим что каждая ФК цепочка содержит один x -кинк. При слабом межцепном взаимодействии мы можем пренебречь отличием формы кинка от СГ формы и подставить в уравнение (11.8) анзац $u_j(x, t) = u_{\text{SG}}(x - X_j(t))$. Тогда, если мы примем во внимание, что x -кинки двигаются в периодическом ПН потенциале с амплитудой ε_{PN} , мы получим следующий эффективный гамильтониан:

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = \sum_j \left[\varepsilon + \frac{m}{2} \left(\frac{dX_j}{dt} \right)^2 + V(X_j - X_{j-1}) + \frac{\varepsilon_{PN}}{2} (1 - \cos X_j) \right]. \quad (11.9)$$

Здесь $\varepsilon = 4d/\pi$, $m = 4/\pi d$, а потенциальная энергия межкинкового взаимодействия описывается выражением

$$V(X) = \varepsilon [\alpha W_1(X/d) - \beta W_2(X/d)], \quad (11.10)$$

где $\beta = \gamma/d^2$,

$$W_1(Y) = (1 + Y/\sinh Y) \tanh^2(Y/2) \quad (11.11)$$

и

$$W_2(Y) = 1 - Y/\sinh Y. \quad (11.12)$$

Таким образом, при малых X ($|X| \ll d$) взаимодействие будет гармоническим, $V(X) \simeq \frac{1}{2}GX^2$ с эффективной постоянной жесткости $G = m(\alpha - \beta/3)$, в то время как при $|X| \rightarrow \infty$ мы получим $V(X) \rightarrow E_{\text{dis}}$, где $E_{\text{dis}} = \varepsilon(\alpha - \beta)$. В зависимости от значения параметров системы, основное состояние при $T = 0$ анизотропной скалярной 2D ФК системы может соответствовать одной из следующих конфигураций:

1. В случае межатомного отталкивания x -кинки тоже отталкиваются друг от друга и для концентрации атомов незначительно большей или меньшей концентрации соответствующей соразмерной решетке, x -кинки должны образовывать структуры типа $c(2 \times 2)$ с непрерывно изменяющимся периодом вдоль X осей;
2. Для некоторых параметров системы, когда $G < 0$ но $E_{\text{dis}} > 0$, должны возникать “наклонные” цепочки x -кинков;
3. Наконец, в случае притягивающего взаимодействия между атомами, ОС соответствуют y -цепям x -кинков. Именно этот случай главным образом изучен в литературе. Заметим, что уравнение (11.2), являющиеся прямым обобщением модели ФК, приводит только к этой ситуации.

Все эти ситуации наблюдались экспериментально в адсорбируемых системах (см. ссылки в работе [47]).

Различные конфигурации атомов, такие как точечные дефекты, ступеньки и дислокации были изучены численно в рамках обобщенных двухмерных [801] и трехмерных [802] скалярных моделей Френкеля-Конторовой.

Анизотропный кристалл моделировался как система параллельных гармонических цепей, в которой атомы ближайших соседних цепей взаимодействуют через потенциал Леннарда-Джонса или Морса, так что “потенциал подложки” для данной цепи создается атомами соседних цепей. Интересный результат полученный здесь состоит в том, что кинки принадлежащие БС цепям слабо отталкиваются друг от друга на больших расстояниях, но начинают притягиваться на коротких расстояниях, так что они могут образовывать связанное состояние. Такое поведение следует из уравнения (11.10) для параметров $\alpha \sim 2\beta$.

Все обобщения модели ФК, которые учитывают взаимодействие только *конечного* числа соседних атомов, всегда приводят к экспоненциальному взаимодействию между локальными дефектами такими как кинки. С другой стороны, упругое взаимодействие (которое всегда присутствует в твердом теле) двух дефектов находящихся на расстоянии R в трехмерном кристалле должно убывать согласно степенному закону $\propto R^{-3}$. Для решения этой задачи и описания точечных дефектов в трехмерной решетке, Ковалев и др. [65] предложили окружить ФК цепь “трубой” радиуса $b \sim a_s$ и рассмотреть часть тела вне трубки как упругую континуальную среду. Упругие смещения атомов тела находящихся вне трубы описываются полем смещений $w(x, y, z)$, которое удовлетворяет уравнению $\lambda w_{xx} + \mu(w_{yy} + w_{zz}) = 0$, где λ – модуль сжатия вдоль ФК цепи, а μ является модулем сдвига в плоскости YZ (для простой скалярной модели теории упругости). Если мы обозначим через $w_0(x)$ поле смещений на поверхности трубы, тогда уравнение стационарности цепи ФК в континуальном приближении будет иметь форму $d^2 u_{xx}(x) = \sin[u(x) - w_0(x)]$. К этому уравнению нужно теперь добавить граничное условие $\mu a_s^2 b (\partial w / \partial \rho)|_{\rho=b} = \sin(w_0 - u)$, где $\rho = (y^2 + z^2)^{1/2}$. В результате было получено и проанализировано обобщенное интегродифференциальное уравнение СГ-типа [подобное уравнению (3.147) параграфа 3.5.4, где дальнедействующее взаимодействие было введено искусственно “руками”]. В частности, было показано, что энергия взаимодействия между двумя кинками находящимися на расстоянии R ведет себя как $v_{\text{int}}(R) \approx \varepsilon_k (d/R)^3$.

Скалярная модель для $\theta < 1$. В рассмотренном выше случае $\theta = 1$, один дополнительный кинк (антикинк) вставленный в цепь, соответствует одному лишнему атому (или одной вакансии). Следовательно, если атомы отталкиваются друг от друга, кинки тоже должны отталкиваться друг от друга. Однако, для фоновой структуры с $\theta = p/q$, когда p и q являются целыми числами, число $p < q$, ситуация не является такой тривиальной, так как теперь один лишний атом соответствует q кинкам.

В качестве примера, давайте рассмотрим двухмерную ФК решетку с прямоугольной симметрией при $\theta = 1/2$. Для отталкивающего межатомного взаимодействия ОС системы соответствует структуре $c(2 \times 2)$. Следовательно, атомы в данной цепочке чувствуют потенциал от ближайших соседних цепочек, который должен быть добавлен к потенциалу подложки, так что полный эффективный внешний потенциал для данной цепочки соответствует потенциалу двойного $\sin$ -Гордона (ДСГ), то есть он имеет период $2a_s$. Напомним что в изолированной ФК цепи с концентрацией $\theta = 1/2$ один вставленный атом создает два кинка, которые отталкиваются друг от друга. Теперь, в двухмерной системе, оба эти кинка являются ДСГ кинками. Кроме того, структура атомов между кинками не соответствует конфигурации ОС, а соответствует метастабильной конфигурации, так как создает сдвиг a_s , в то время как период структуры ОС равен $2a_s$. В результате, два ДСГ кинка принадлежащие ближайшим соседним цепям, будут дополнительно притягиваться друг к другу с потенциалом взаимодействия который прямо пропорционален расстоянию Δx между кинками.

Тогда, если двухмерная система имеет две пары кинков, одна пара в одной цепи и другая пара в другой ближайшей соседней цепи, эти пары будут эффективно притягиваться друг к другу, так как перекрытие внутрикинковых областей понижает энергию системы. Наконец, если мы вставим один лишний атом в *каждую* x -цепь, мы создадим две y -цепочки x -кинков, которые теперь отталкиваются друг от друга, так что при $\theta = 1/2 \pm \delta$ ($\delta \rightarrow 0$) ОС соответствует полосатой структуре y -цепей. Подчеркнем, что x -кинки в ближайших соседних каналах являются притягивающими даже когда атомы сами по себе отталкиваются друг от друга. Однако, это межкинковое притяжение не является слишком “сильным”, теперь потенциал межкинкового притяжения пропорционален $\propto \Delta x$, а не $\propto (\Delta x)^2$.

Бесконечная y -цепь не может быть разорвана. Однако, две ближайшие соседние y -цепи могут быть разорваны *одновременно*. Кроме того, можно создать пару *конечных* y -цепей, в которой одна состоит из x -кинков, а другая из x -антикинков, но эти y -цепи должны образовывать *замкнутую петлю*.

Для концентрации $\theta = p/q$ с $q \geq 3$ ситуация подобна, но более сложна. Ясно, что все упомянутые выше эффекты существенно влияют как на фазовую диаграмму системы при $T \neq 0$ так и на динамику системы.

11.2.1 Статистическая физика

Равновесное состояние скалярной двумерной модели ФК при $T \neq 0$ было в основном изучено в рамках гармонического взаимодействия (11.2). Напомним, что этот вариант модели при низких температурах показывает формирование y -цепей x -кинков, обычно называемых как доменные стенки (ДС), плоские солитоны, линии несоответствия, линейные дефекты. Анизотропная модель с $g_y = \gamma g_x$ (γ – параметр модели, $0 \leq \gamma \leq 1$) в уравнении (11.2) для случая постоянной плотности (то есть, при использовании периодических граничных условий в обоих направлениях) была изучена при помощи метода молекулярной динамики Йошида с соавторами [803, 804] и Като с соавторами [805]. В частности, моделирование показало, что при малых T существуют остаточные (“геометрические”) ДС-линии и флуктуации ширины ДС [см. рис. 11.1(a)]. Когда температура возрастает, в x -цепях появляются термически возбужденные кинк-антикинковые пары, а связывание этих x -кинков принадлежащих соседним x -цепям отражается в рождении “петель” [рис. 11.1(b)]. Как обычно, с дальнейшим увеличением T , x -кинки так же как и y -цепи термически разрушаются. Вклад кинков в равновесные свойства системы подобен вкладу полученному в одномерной модели. Для примера, зависимость теплоемкости от температуры снова демонстрирует пик при $T \sim \varepsilon_k$, но положение пика теперь зависит от параметра анизотропии γ [803].

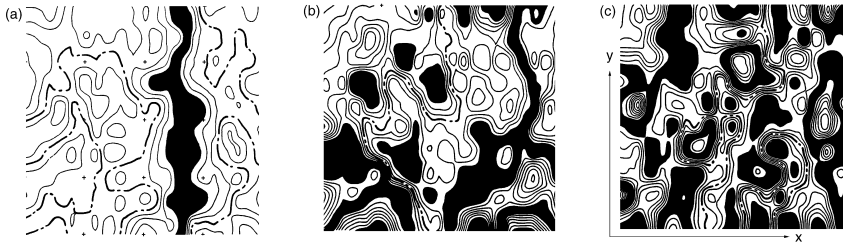


Рис. 11.1. Контурные линии смещений атомов для изотропной скалярной модели ФК при (a) $T = 0.05$, (b) $T = 0.2$, и (c) $T = 0.35$. Черный тон (белый тон) показывает области около вершины (дна) потенциала подложки [805].

Термодинамические свойства системы параллельных полос (доменных полос) была широко изучена аналитически (см., например, монографию Люксютова и др. [48] и приведенные в ней ссылки). Приведем кратко основные результаты этих исследований. Пусть R_x является периодом решетки ДС в x -направлении, а $a_x = q_x a_{sx}$ является периодом фоновой структуры. При $T \neq 0$ линия ДС огрубляется из-за тепловых колебаний. Это увеличивает среднюю энергию отталкивания соседних стенок из-за ангармоничности взаимодействия x -кинков. Кроме того, смещения доменных стенок ограничиваются их “столкновениями”, это приводит к уменьшению энтропии системы. Оба фактора дают вклад в свободную энергию (на единицу длины стенки) которая равна [806]–[810]

$$\Delta F \simeq (k_B T)^2 a_x^2 / R_x^2 \varepsilon_k a_{sy}. \quad (11.13)$$

Таким образом, эффективное отталкивание между стенками подчиняется степенному закону (11.13) даже в случае коротко-действующего межатомного взаимодействия, когда при $T = 0$ (“механическое”) взаимодействие стенка–стенка убывает экспоненциально с R_x .

Когда R_x является соизмеримым с a_x , основное состояние при $T = 0$ является кристаллическим (соразмерная фаза). Но при $T \neq 0$ линии ДС флуктуируют и при температуре T_{depin} эти флуктуации становятся равными периоду ПН a_x . В результате, при $T > T_{\text{depin}}$ доменные стенки становятся эффективно незакрепленными, и равновесное состояние будет соответствовать плавающей (несоразмерной) фазе. Этот фазовый переход происходит при выполнении неравенства $R_x/a_x \geq 4$ [811, 812]. При дальнейшем возрастании T плавающая фаза расплавляется. Если $q_x = 1$ или 2, плавление происходит по механизму Костерлица-Таулеса из-за образования ядер дислокационных пар в решетке ДС (заметим, что в этом случае переход происходит только за один шаг). теория этих процессов была развита Люксютовым [813] и Купершмитом с соавторами [814].

С другой стороны, если $T = 0$ но меняется θ , система проходит через бесконечное множество структур, которые образуют дьявольскую лестницу. Но для $T \neq 0$ большинство высоко-упорядоченных соразмерных структур являются плавающими или жидкими (неупорядоченными). Более подробные детали о (T, θ) или (T, μ) фазовых диаграмм можно найти в монографии Люксютова с соавторами [48].

11.2.2 Динамические свойства

Транспорт массы в скалярной модели ФК является одной из важных задач физики твердого тела (например, мы можем вспомнить движение дислокаций, пластичность и податливость металлов и т.д.), поэтому она изучалась в течение длительного времени. При высоких температурах динамические свойства могут быть изучены методами теории возмущения подобно одномерному случаю (см. параграф 7.4). При низкой температуре, однако, поток атомов в виде согласованного движения атомов происходит в результате действия внешней силы F или градиента концентрации атомов. Давайте предположим, что постоянная внешняя сила приложена вдоль x -направления и кратко обсудим как образование y -цепочек x -кинков может модифицировать диффузионные характеристики системы. В начале всего вспомним, что для неавтодействующих x -цепочек энергия активации движения вдоль x -направления равна высоте ПН рельефа, $\varepsilon_a \simeq \varepsilon_{PN0}$. Также известно, что отталкивание x -кинков должно приводить к уменьшению активационного барьера, $\varepsilon_a < \varepsilon_{PN0}$. С другой стороны, в случае притяжения x -кинков барьер ε_a должен обычно возрастать. Например, y -цепочка x -кинков при конечной длине должна двигаться за счет рождения y -кинков на одном конце y -цепи и его последующего движения вдоль оси Y к другому концу цепи (см. параграф 10.3.2), так что $\varepsilon_a \simeq \frac{1}{2}E_{\text{pair}} + E_{PN}$. В случае бесконечной y -цепи x -кинков, движение начинается с рождения пары y -кинк- y -антикинк и затем переходит в их движение в противоположных направлениях [см. рис. 11.2(a)], этот сценарий требует энергии $\varepsilon_a \simeq E_{\text{pair}} + E_{PN}$. Таким образом, при малых значениях F и $T \neq 0$ поток атомов является термически активируемым процессом с энергией активации ε_a определяемой параметрами системы.

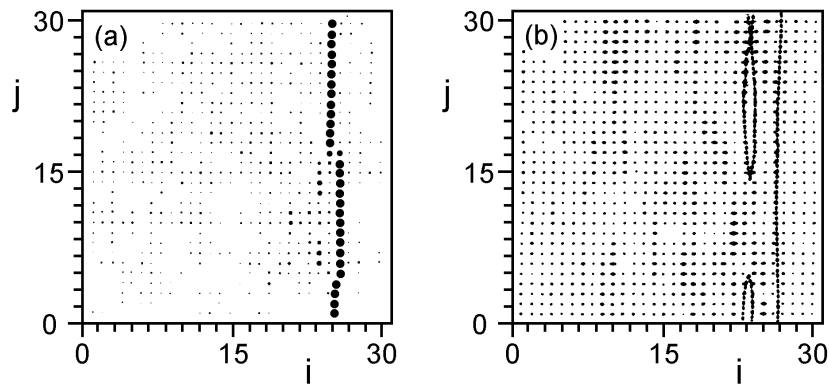


Рис. 11.2. Контурный график смещений u_{lx}, u_{ly} для скалярной модели ФК (11.1)–(11.2) находящейся под действием постоянной внешней силы F в присутствии внешнего трения η . Размер точек отображает скорость атома. Начальная конфигурация соответствует одной неподвижной ДС (y -цепи). Рисунки вычислены при помощи метода молекулярной динамики для случая слабого трения (в безразмерных единицах $\eta = 0.085$) для двух значений приложенной силы F : (a) $F = 1.1$ при $t = 400$, когда появилась одиночная y -кинк- y -антикинковая пара, и (b) $F = 1.2$ при $t = 300$, когда вслед за движущейся стенкой возникают петли [230].

С другой стороны, при $T = 0$ поток атомов начинается когда внешняя сила превышает некоторое критическое (депинингирующее) значение силы F_c необходимое для преодоления барьеров активации. Эта задача была изучена Паже с соавторами [230] для модели (11.1)–(11.2) в случае слабого внешнего трения. Снова, если имеется одна y -цепочка (доменная стенка) в начальном состоянии, она будет развиваться согласно описанному выше сценарию [через образования y -кинк- y -антикинковых пар, см. рис. 11.2(a)]. Однако, при численном моделировании были обнаружены и затем объяснены при помощи анализа устойчивости следующий новый интересный эффект: если приложенная сила достаточно высока ($F \geq 1.1$ в безразмерных единицах), то может происходить образование добавочной последовательности “стенка-антистенка” позади первичной стенки, приводящее к образованию “двойного слоя” [см. рис. 11.2(b)]. Можно ожидать, что этот эффект будет даже более явным при $T \neq 0$ вследствие термически активированного рождения петель. Коломенский с соавторами [815] показали также что в случае слабого трения ДС под действием постоянной силы становится неустойчивой относительно случайного малого изменения силы для определенных ее значений.

Как известно из теории дислокаций, движение протяженного объекта, такого как y -цепь (доменная стенка) существенно зависит от присутствия примесей которые могут “прикреплять” y -цепочку. Когда двигающаяся ДС встречается с “пробкой”, то для дальнейшего движения y -цепи должен произойти либо ее “отрыв от” пробки (для этого необходимо преодоление энергии связи атомов цепи с примесью), либо “разрыв” y -цепи (один из атомов ДС остается на ячейке с примесью), последнее требует энергии E_{dis} . В связи с поверхностной диффузией эти вопросы были рассмотрены Люксютовым и Покровским [816].

11.3 Модель зигзага

Классическая модель ФК так же как и описанные выше ее обобщения одно существенное ограничение: атомы могут двигаться только в одном измерении. Таким образом, дальнейшим естественным развитием модели является удаление этого ограничения и разрешение атомам иметь две или более степеней свободы. В простейшем случае давайте предположим, что каждый атом может двигаться в двух измерениях, скажем в x и y , и находится в двухмерном внешнем потенциале, который является периодическим в одном направлении (x) и неограниченным (например, параболическим) в перпендикулярном направлении y , так что движение атомов в поперечном направлении ограничено. Таким образом, потенциал подложки $V_{\text{sub}}(\mathbf{r}) = V_x(x) + V_y(y)$, где $V_x(x) = (\epsilon_s/2)[1 - \cos(2\pi x/a_s)]$ и $V_y(y) = (m_a/2)\omega_{0y}^2 y^2$. Здесь ω_{0y} является частотой колебания единичного атома в поперечном направлении. Предел $\omega_{0y} \rightarrow \infty$ соответствует стандартной модели ФК. Как и везде в книге мы будем использовать единицы размерности такие, что $m_a = 1$, $\epsilon_s = 2$ и $a_s = 2\pi$, так что частота продольных колебаний $\omega_{0x} = (\epsilon_s/2m_a)^{1/2}(2\pi/a_s)$ равна 1.

Модель с перпендикулярной степенью свободы имеет не только один академический интерес. Во первых, эта модель может быть рассмотрена как простейшее приближение для *анизотропной* векторной двухмерной модели ФК где мы должны ожидать, что малое взаимодействие между ближайшими соседними линиями не должно существенно модифицировать свойства системы. Во вторых, модель может быть рассмотрена как первый шаг в изучении *изотропной* векторной двухмерной модели ФК. Наконец, модель важна сама по себе, так как различные нелинейные феномены в физике твердого тела могут быть описаны моделью, где цепочка взаимодействующих частиц находится в некотором “канале”.

Модель с перпендикулярной степенью свободы все еще описывает одномерную цепочку атомов. Однако, когда мы рассмотрим *векторную* модель, мы потеряем главное преимущество одномерной модели ФК, в которой атомы всегда остаются строго упорядоченными и, следовательно, они могут быть пронумерованы в таком порядке, что атом l всегда имеет атомы $l \pm 1$ своими ближайшими соседями. В реалистической двумерной модели последовательный порядок атомов может быть изменен при введении дополнительного измерения. Также, из-за потери такого порядка, мы должны использовать более строгую векторную модель учитывающую взаимодействие между *всеми* атомами системы. Тем не менее, концепция топологически устойчивых квазичастиц (кинков) классической модели ФК остается очень полезной и поучительной.

Пока атомы используют только притягивающую ветвь потенциала взаимодействия, статистические свойства модели эквивалентны свойствам стандартной модели ФК. Однако, во многих физических системах межатомное взаимодействие является отталкивающим или по крайней мере имеет отталкивающую ветвь. Это может быть из-за Кулоновского отталкивания между ионами в суперионных проводниках или между протонами в молекулах связанных водородными связями, или из-за Кулоновского или диполь-дипольного отталкивания атомов адсорбированных на поверхностях полупроводников или металлов. Так как качественные результаты не зависят от специфической формы межатомного потенциала, при условии что отталкивание является вогнутым, то далее мы для конкретности рассмотрим только кулоновское отталкивание

$$V_{\text{int}}(r) = V_0/r, \quad (11.14)$$

где параметр V_0 характеризует амплитуду отталкивания. Ясно что для отталкивающего взаимодействия мы должны изучать системы с фиксированной плотностью, то есть использовать периодические граничные условия.

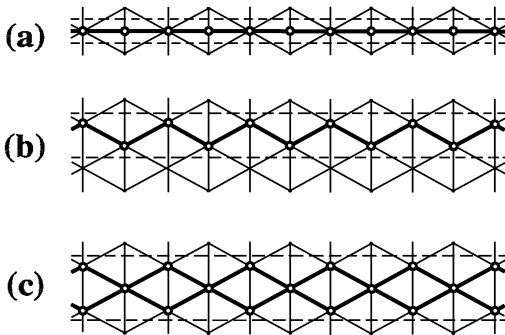


Рис. 11.3. Конфигурации атомов в двухмерных моделях ФК с перпендикулярной степенью свободы. Показаны отдельные полосы соответствующие: (а) “тривиальному основному состоянию” (ТОС); (б) “зигзагообразному основному состоянию” (ЗОС) и (с) “ромбоздрической” конфигурации атомов [817].

Когда величина межатомного отталкивания увеличивается (или уменьшается кривизна поперечного потенциала) выше определенного порогового значения, тривиальное основное состояние [ТОС, рис. 11.3(а)] модели подвергается серии бифуркаций. Первая бифуркация всегда приводит к зигзагообразному основному состоянию [ЗОС, рис. 11.3(б)] и проявляется в радикальном изменении свойств системы, включая появления точки максимума

у эффективной постоянной упругости. Для несоразмерной системы, бифуркации могут взаимодействовать с переходом Обри из закрепленного в скользящее состояние. Более того, зигзагообразное основное состояние может даже быть причиной многократных переходов Обри (см. параграф 11.3.2). С другой стороны, для соразмерной системы зигзагообразная модель может иметь несколько типов кинков. В параграфе 11.3.3 мы даем общую схему классификации топологических возбуждений для сложного основного состояния, а в параграфе 11.3.4 рассмотрены кинки для ЗОС. Вблизи точки бифуркации, так же как и выше этой точки, динамические свойства зигзагообразной модели ФК существенно изменяются. Значение этих для реалистических систем будет далее кратко обсуждено в параграфе 11.3.5.

11.3.1 Основное состояние

Для нахождения конфигурации ОС при $T = 0$, мы должны найти абсолютный минимум потенциальной энергии системы

$$U = \sum_{i=1}^N \left[V_{\text{sub}}(\mathbf{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i'=1}^{N^*} [V_{\text{int}}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i+i'}|) + V_{\text{int}}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i-i'}|)] \right], \quad (11.15)$$

где индекс i нумерует атомы, а пределы $N, N^* \rightarrow \infty$. Когда координаты ОС $\{\mathbf{r}_i^{(0)}\} \equiv \{x_i^{(0)}, y_i^{(0)}\}$ будут найдены, нужно исследовать устойчивость ОС через вычисление фононного спектра. Спектр задается собственными частотами матрицы упругости $\mathbf{A}$ определенной как

$$A_{ii}^{\alpha\alpha'} = \left(\frac{\partial^2 V_{\text{sub}}(\mathbf{r}_i)}{\partial u_i^\alpha \partial u_i^{\alpha'}} + \sum_{i' \neq i} \frac{\partial^2 V_{\text{int}}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i'}|)}{\partial u_i^\alpha \partial u_{i'}^{\alpha'}} \right)_{\text{all } \mathbf{u}=0},$$

$$A_{ii'(i \neq i')}^{\alpha\alpha'} = \left(\frac{\partial^2 V_{\text{int}}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i'}|)}{\partial u_i^\alpha \partial u_{i'}^{\alpha'}} \right)_{\text{all } \mathbf{u}=0},$$

где греческие индексы соответствуют Декартовым координатам ($\alpha, \alpha' = x$ или y), а вектор $\mathbf{u}_i = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_i^{(0)}$ описывает смещение i -го атома из своего положения равновесия. Если безразмерная концентрация θ является рациональной, так что конфигурация ОС является соразмерной, то структура атомов периодична и поэтому удобно сделать преобразование Фурье

$$D_{mm'}^{\alpha\alpha'}(k) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} A_{0,m;l,m'}^{\alpha\alpha'} e^{ikla}. \quad (11.16)$$

Здесь a является периодом структуры ОС, а индексы атомов i разделены на два подиндекса, $i = (l, m)$, где l нумерует элементарную ячейку, в то время как $m = 1, \dots, s$ обозначает атомы в ячейке. Для каждого момента k ($|k| \leq \pi/a$), $\mathbf{D}(k)$ является квадратной $2s \times 2s$ матрицей и фононный спектр состоит из $2s$ ветвей нумеруемых индексом j . Частоты $\omega_j(k)$ определяются из уравнения на собственные значения

$$\det [\omega^2(k) \mathbf{1} - \mathbf{D}(k)] = 0. \quad (11.17)$$

Для устойчивой конфигурации все собственные значения должны быть положительными. Когда, при некоторых значениях параметров модели, одно из собственных значений становится нулевым, $\omega_j(k^*) = 0$, то соответствующая конфигурация становится неустойчивой и переходит в новую конфигурацию с периодом $a^* = \pi/k^*$. Собственный вектор связанный с обнуляющейся частотой помогает найти новое ОС. Этот сценарий соответствует непрерывному (второго порядка) фазовому переходу. Кроме того, модель может также показывать разрывные (первого порядка) переходы при изменении модельного параметра (например, V_0). Они происходят когда энергия метастабильного состояния становится равной энергии конфигурации ОС в точке перехода $V_0 = V_{\text{bif}}^{(m)}$. За этой точкой метастабильная конфигурация и ОС меняются местами.

В стандартной модели ФК центральную роль играет безразмерная постоянная упругости

$$g = (a_s^2 / 2\pi^2 \varepsilon_s) V_{\text{int}}''(a_A).$$

В двухмерной модели, подобную роль играет усредненная постоянная упругости

$$g_{\text{eff}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g_i \quad (11.18)$$

$$g_i = \frac{1}{2} \sum_{i'=1}^{N^*} \left[\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} (V_{\text{int}}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i+i'}|) + V_{\text{int}}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i-i'}|)) \right]_{\text{all } \mathbf{u}=0}, \quad (11.19)$$

(для стандартной модели ФК g_{eff} совпадает с g).

Давайте рассмотрим простейший случай с тривиальной соразмерной концентрацией $\theta = 1/q$ с целым q , когда среднее межатомное расстояние $a_A = qa_s$. При малой амплитуде межатомного отталкивания ОС будет тривиальным (ТОС), в нем все атомы расположены в минимумах соответствующих ям, т.е. $x_i^{(0)} = ia_A$ и $y_i^{(0)} = 0$. Элементарная ячейка системы содержит только один атом, а фононный спектр состоит из двух ветвей. Первая ветвь соответствует движению вдоль направления x ,

$$\omega_1^2(k) = \omega_{0x}^2 + 2 \sum_{l=1}^{\infty} V''_{\text{int}}(la_A)[1 - \cos(kla_A)], \quad (11.20)$$

а вторая ветвь – движению вдоль направления y ,

$$\omega_2^2(k) = \omega_{0y}^2 + 2 \sum_{l=1}^{\infty} [V'_{\text{int}}(la_A)/(la_A)][1 - \cos(kla_A)], \quad (11.21)$$

где $|k| \leq 1/2q$. Заметим, что в ТОС движения вдоль направлений x и y являются разделенными.

Когда величина взаимодействия возрастает для отталкивающего межатомного взаимодействия, $V'_{\text{int}}(la_A) < 0$, частота $\omega_2(k)$ убывает и достигает нуля при некотором критическом значении $V_0 = V_{\text{bif}}$. Если межатомное отталкивание монотонно убывает с увеличением r [то есть если производная $V'_{\text{int}}(r)$ всегда отрицательна], первая неустойчивость появляется при $k = \pm 1/2q$. Соответствующее бифуркационное значение V_{bif} может быть определено из уравнения

$$\omega_{0y}^2 + 4 \sum_{p=0}^{\infty} \frac{V'_{\text{int}}[(2p+1)a_A]}{(2p+1)a_A} = 0. \quad (11.22)$$

В частности, для кулоновского отталкивания (11.14) $V_{\text{bif}} = \omega_{0y}^2 a_A^3 / 4C$, где $C \equiv \sum_{p=0}^{\infty} (2p+1)^{-3} = 1.05179 \dots$

Таким образом, для любого монотонно убывающего межатомного отталкивания первая бифуркация всегда приводит к *непрерывному* переходу из тривиального основного состояния рисунка 11.3(а) в зигзагообразное основное состояние (ЗОС) рисунка 11.3(б) с координатами атомов $x_i^{(0)} = ia_A$, $y_i^{(0)} = (-1)^i b$. Амплитуда поперечного сдвига b определяется из уравнения

$$\omega_{0y}^2 + 4 \sum_{l=0}^{\infty} V'_{\text{int}}(r_l)/r_l = 0, \quad r_l = [4b^2 + a_A^2(1+2l)^2]^{1/2}. \quad (11.23)$$

В ЗОС значение поперечного расщепления b возрастает с ростом V_0 как показано на рис. 11.4(б). Постоянная упругости g_{eff} для ТОС возрастает линейно с ростом V_0 до значения $g_{\text{bif}} \approx 9\omega_{0y}^2/16$. Но после бифуркации g_{eff} убывает, достигает локального минимума $g_{\text{min}} \approx 4.7\omega_{0y}^2/16 \sim 0.5g_{\text{bif}}$ и затем снова возрастает [см рис. 11.4(с)]. Пик постоянной упругости g_{eff} при точке бифуркации V_{bif} объясняет многие замечательные свойства модели.

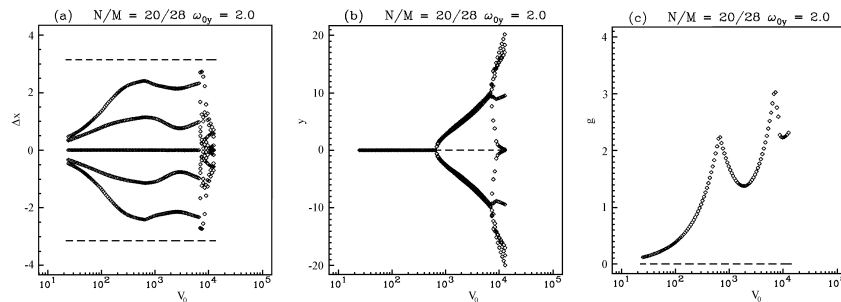


Рис. 11.4. (а) Продольные смещения Δx атомов относительно ближайшего минимума $V_x(x)$, (б) поперечные смещения y , и (с) усредненная постоянная упругости цепи как функции от V_0 для $\theta = 5/7$ ($N = 20$, $M = 28$, $N^* = 60$) и $\omega_{0y} = 2$. Рисунок показывает две бифуркации структуры атомов [817].

С дальнейшим увеличением V_0 (или убыванием ω_{0y}) система совершает следующие переходы в более сложные конфигурации ОС. Для симметричного поперечного потенциала, такого как параболический, эти переходы являются разрывными, в отличие от непрерывного первого перехода в ЗОС. А именно, вблизи точки

перехода обе конфигурации, например зигзагообразная и ромбическая, являются устойчивыми, но одна из них соответствует ОС в то время как другая соответствует метастабильной конфигурации с более высокой энергией. В точке перехода, энергии обеих конфигураций становятся равными друг другу. Последовательность структур ОС может быть описана качественно следующим образом. Когда продольный потенциал подложки является несущественным (например, когда $\omega_{0y} \gg \omega_{0x}$), последовательность конфигураций ОС может быть рассмотрена как уширяющиеся полосы "вырезанные" из двухмерной гексагональной решетки, как показано на рис. 11.3, где продольная постоянная решетки a_{cell} определяется из концентрации атомов θ [$a_{\text{cell}} = (a_s/\theta)s'$, $s' = 2, 3, 4, 5, \dots$ для зигзагообразной, ромбоэдрической, двойного зигзага, гексагональной, и т.д. конфигураций соответственно], в то время поперечное смещения атомов изменяются так, чтобы приспособиться к поперечному потенциалу $V_y(y)$. С другой стороны, для асимметричного поперечного потенциала, такого как потенциал Тоды,

$$V_y(y) = \omega_{0y}^2 y_{\text{anh}}^2 [\exp(-y/y_{\text{anh}}) + (y/y_{\text{anh}}) - 1], \quad (11.24)$$

где постоянная ангармонизма $\beta = y_{\text{anh}}^{-1}$, непрерывными могут быть не только первая бифуркация, но также несколько бифуркаций более высокого порядка [817].

11.3.2 Переходы Обри

Наличие максимумов у $g_{\text{eff}}(V_0)$ в модели с поперечной степенью свободы также оказывает сильное влияние в несоразмерном случае на переход Обри. В классической модели ФК при увеличении постоянной упругости g в несоразмерной структуре происходит переход Обри, который можно объяснить в терминах положений атомов относительно максимумов потенциала подложки. Для слабого взаимодействия (то есть при $g < g_{\text{Aubry}}$), доминирует потенциал подложки. Атомы стремятся оставаться вблизи минимумов потенциальных ям (вблизи максимума имеется запрещенная область). В результате, цепочка атомов оказывается закрепленной подложкой, так как ее смещение требует движения атомов через максимумы потенциала подложки. В противоположность этому, при $g > g_{\text{Aubry}}$, в конфигурации доминируют межатомные взаимодействия и все уровни потенциала подложки заняты атомами, некоторые из них находятся на вершинах барьеров. Когда цепочка атомов движется вверх подложки, некоторые атомы идут вниз потенциала, в то время как другие идут вверх и для движения не существует барьера.

Возникает вопрос, до какой степени введение поперечной степени свободы оказывает влияние на переход Обри. Ответ может быть получен из описанного выше поведения постоянной упругости g_{eff} при изменении V_0 . Так как точка бифуркации V_{bif} определяется кривизной поперечного потенциала подложки, $V_{\text{bif}} \propto \omega_{0y}^2$, в то время как переход Обри существенно связан с продольными смещениями, то относительные положения этих двух переходов могут изменяться при изменении значений параметров модели. Можно предсказать следующие три различных сценария поведения системы при увеличении V_0 :

(а) Случай когда частота ω_{0y} лежит ниже первого порогового значения ω^* , $\omega_{0y} < \omega^*$, так что $V_{\text{bif}} < V_{\text{Aubry}}$. В этом случае переход Обри совсем не будет происходить, так как первая бифуркация, переход в зигзагообразное состояние, приводящий к уменьшению эффективного межатомного взаимодействия, происходит до того как g_{eff} достигнет значения g_{Aubry} необходимого для перехода. Беря $g_{\text{Aubry}} \simeq 1$ для значения $\theta_{\text{g.m.}}$ равному золотому среднему, величину ω^* можно оценить как $\omega^* \approx 4/3$;

(б) Случай большой частоты ω_{0y} , $\omega_{0y} > \omega^{**}$ (где ω^{**} является вторым характеристическим значением), для которой $V_{\text{bif}} \gg V_{\text{Aubry}}$ и $g_{\text{Aubry}} < g_{\text{min}} \equiv \min g_{\text{eff}}(V_0)$ для всех V_0 в рамках ЗОС. В этом случае переход Обри происходит когда V_0 достигает V_{Aubry} и бифуркация, которая происходит позже, не приносит никакого качественного изменения в поведение системы, так как минимум g_{eff} после бифуркации оказывается выше значения g_{Aubry} . Качественные изменения могут появляться только у бифуркаций более высокого порядка (например, при переходе в РОС). Взяв $g_{\text{min}} \simeq 0.5 g_{\text{bif}}$, значение ω^{**} можно оценить как $\omega^{**} \approx 4\sqrt{2}/3 \approx 1.9$ для $\theta = \theta_{\text{g.m.}}$;

(в) Для промежуточного значения частоты ω_{0y} , $\omega^* < \omega_{0y} < \omega^{**}$, когда V_0 увеличивается, система совершает первый переход Обри в котором пинингованное ОС трансформируется в скользящее ОС. Но тогда бифуркация в зигзагообразное состояние может уменьшать среднюю постоянную упругости ниже g_{Aubry} . Система совершает *обратный* обратный переход Обри и решетка на подложке снова становится закрепленной. Дальнейшее увеличение g_{eff} , которое происходит после минимума, может вызывать снова прямой переход Обри восстанавливающий скользящее состояние, по крайней мере до второй бифуркации.

Эти предсказания были проверены численно Брауном и Пейраром [817] для цепи с значениями $N = 34$ и $M = 47$, которые дают концентрацию близкую к значению $\theta'_{\text{g.m.}} = (3 + \sqrt{5})/(5 + \sqrt{5})$ эквивалентному золотому среднему для перехода Обри. В этом случае поперечная частота $\omega_{0y} = 1$ и для всех значений V_0 постоянная упругости не достигает порогового значения $g_{\text{Aubry}} \simeq 1$. Поэтому ОС остается закрепленным для всех V_0 . Для случая $\omega_{0y} = 2$ переход Обри происходит в ТОС. Затем, после бифуркации смещения атомов немного уменьшаются. Однако численное моделирование показало, что до второй бифуркации атомы остаются

вблизи максимумов потенциала, так что скользящая фаза сохраняется до второй точки бифуркации. Более чувствительный тест обеспечивался вычислением линейного отклика цепи атомов на внешнюю постоянную силу F приложенную ко всем атомам вдоль направления оси x . Вычисляя средний сдвиг атомов $\Delta x_{\text{shift}} = N^{-1} \sum_{i=1}^N (x_i - x_i^{(0)})$ от их положений без силы, $x_i^{(0)}$, мы можем определить восприимчивость как $\chi = \Delta x_{\text{shift}}/F$. Можно ожидать, что $\chi \rightarrow \omega_{0x}^{-2}$ при $V_0 \rightarrow 0$ и что $\chi \rightarrow \infty$ в скользящем состоянии. Так как при численном моделировании значение θ всегда является рациональным, то ОС будет оставаться слегка закрепленным даже выше перехода Обри. Результаты моделирования показывают резкое падение χ^{-1} когда достигается точка перехода Обри, после этого значение χ^{-1} остается практически равным нулю ($\chi^{-1} \approx 5 \cdot 10^{-4}$) для целой области $V_{\text{Aubry}} < V_0 < V_{\text{bif}}^{(2)}$, так что ОС в этом случае действительно является очень близким к скользящему состоянию несмотря на конечность системы.

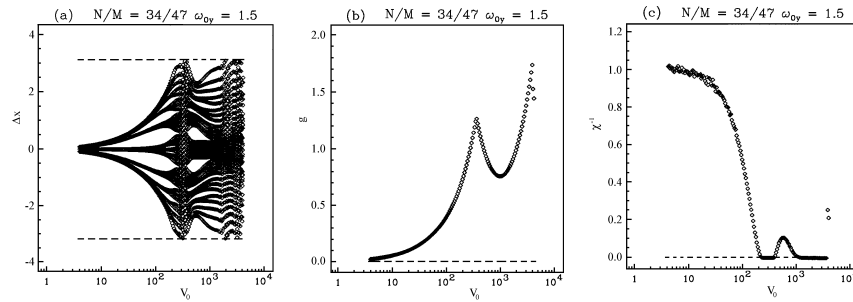


Рис. 11.5. Зависимость (а) продольного смещения, (б) средней постоянной упругости и (с) обратной восприимчивости χ^{-1} от V_0 для “несоизмеримой” структуры ($\theta = 34/47$, $N^* = 34$) при $\omega_{0y} = 1.5$. Обратная восприимчивость показывает существование обратного перехода Обри после которого снова происходит прямой переход, при котором значение χ^{-1} снова понижается до нуля [817].

Результаты для случая $\omega_{0y} = 1.5$, соответствующего промежуточному случаю (с), показаны на рис. 11.5. Как и в предыдущем случае, здесь переход Обри происходит до бифуркации, затем g_{eff} продолжает повышаться до значения $g_{\text{bif}} = 1.189$ [см. рис. 11.5(б)]. Но после бифуркации, которая происходит при $V_{\text{bif}} = 381$, постоянная упругости g_{eff} уменьшается и достигает минимального значения $g_{\text{min}} = 0.771$, которое ниже чем g_{Aubry} при $V_0 = 1079$. Рис. 11.5(б) показывает, что вблизи минимума функции $g_{\text{eff}}(V_0)$ смещения атомов строго убывают и поэтому на вершинах максимумов потенциала $V_x(x)$ атомы отсутствуют. Таким образом, вблизи минимума $g_{\text{eff}}(V_0)$ ОС снова оказывается закрепленным. Это подтверждается поведением восприимчивости [Рис. 11.5(с)], которая свидетельствует, что мы наблюдаем предсказанный обратный переход Обри из скользящего в закрепленное состояние при $V_0 = 578$, когда $g_{\text{eff}} = 0.898$. С дальнейшим увеличением V_0 , после достижения минимального значения постоянная упругости снова начинает возрастать, при $V_0 = 879$, когда $g_{\text{eff}} = 782$, система совершает второй прямой переход Обри до второй бифуркации. После второй бифуркации, состояние всегда остается закрепленным.

11.3.3 Классификация кинков

Следующим шагом рассмотрения зигзагообразной модели является изучение ее топологических возбуждений, которые ответственны за многие аспекты поведения системы, в частности, за транспорт массы. Напомним, что стандартная модель ФК имеет только два типа кинков, кинк, который описывает минимально возможное топологически устойчивое сжатие цепи, и антикинк, который описывает аналогичное растяжение цепи. Простейший случай соответствует тривиальному основному состоянию с $\theta = 1$, так что решетка имеет тривиальную элементарную ячейку и в ОС каждый минимум внешнего потенциала занят одним атомом. В этом случае кинковая (антикинковая) конфигурация описывает один лишний атом (вакансию) вставленный в цепочку, когда все остальные атомы смещаются с целью приспособиться к созданному локальному возмущению. Но когда $\theta = r/p$ (r и p целые числа) с $r \neq p$, элементарная ячейка кристаллического ОС нетривиальна (она содержит более одного атома), и ситуация становится сложной даже для стандартной модели ФК. В частности, теперь кинк характеризуется дробным атомным числом p^{-1} , так что один дополнительный атом вставленный в цепочку создает p кинков. Для зигзагообразной модели определение структуры топологических возбуждений является трудной задачей. Первое, здесь могут существовать возбуждения различных типов. Второе, возникает вопрос как найти *элементарные* возбуждения, которые затем могут быть использованы для построения любого другого возбуждения. Ниже мы описываем, следуя работе Брауна и др. [818], общую процедуру которая позволяет находить эти элементарные возбуждения для любого сложного ОС.

Давайте рассмотрим сложное ОС модели ФК с $\theta = r:p$, так что период структуры ОС равен p (здесь мы берем период внешнего потенциала равным единице), а каждая элементарная ячейка ОС содержит r атомов (мы используем обозначение $\theta = r:p$ вместо $\theta = r/p$ с целью подчеркнуть что для нетривиального ОС r и p могут иметь общий делитель как, для примера, в ЗОС, где $r = p = 2$). Идея состоит в том, чтобы рассмотреть сложное $\theta = r:p$ ОС цепи как комплекс состоящий из r подсистем (подцепочек), каждая из которых характеризуется тривиальной структурой. В одной подцепочке мы можем создать кинки (подкинки) если мы просто сдвинем правую сторону подцепи на целое число периодов потенциала подложки. Таким путем мы можем рассмотреть любое топологическое возбуждение целой системы как конструкцию подкинков. Однако, подцепочки сильно взаимодействуют друг с другом. Следовательно, многие комбинации подкинков запрещены, так как правая сторона цепи должна соответствовать точной конфигурации ОС. Таким образом, задача сводится к поиску разрешенных комбинаций подкинков, и затем к выделению тех комбинаций подкинков, которые соответствуют элементарным, так чтобы любая другая комбинация может быть построена из элементарных.

Полная группа симметрии $\mathcal{S}$ ОС $\theta = r:p$ может быть расщеплена на две подгруппы, $\mathcal{S} = \mathcal{F} \otimes \mathcal{G}$. Первая подгруппа $\mathcal{F}$ является абелевой, $\mathcal{F} \equiv \{T^n\}$, где $n = 0, \pm 1, \dots$. Она генерируется оператором T , который описывает сдвиг цепи как одно целое на расстояние p (то есть, на один период структуры ОС). Вторая подгруппа $\mathcal{G}$ является конечной (“точечной”) группой, которая описывает локальную симметрию сложной элементарной ячейки. Для тривиального ОС, где все атомы лежат на одной линии, $\mathcal{G}$ является циклической группой состоящей из p элементов. Группа $\mathcal{G}$ генерируется оператором G , $\mathcal{G} \equiv \{G^l\}$, $l = 0, 1, \dots, p-1$ и $G^p = G^0 = 1$, где G соответствует сдвигу цепи как одного целого на единичное расстояние (то есть, на один период потенциала подложки). С другой стороны, когда ОС является нетривиальным, точечная группа $\mathcal{G}$ дополнительно включает элемент J ($J^2 = 1$), который описывает “инверсию” ОС. Для примера, в зигзагообразной модели выше первой точки бифуркации, когда атомы в ОС сдвинуты из линии в перпендикулярном направлении, действие J на ОС производит “зеркальное отображение” состояния относительно линии цепи. Таким образом, для случая когда r и p не являются взаимно простыми и r четное, ОС будет дополнительно двукратно вырожденным.

В общем случае, чтобы создать топологическое возбуждение в цепи, мы должны выбрать элемент полной группы симметрии и подействовать этим оператором на ОС, получив таким образом новую конфигурацию ОС, и затем искать кинковую конфигурацию которая связывает старое и новое основные состояния, то есть найти конфигурацию с минимальной энергией с граничными условиями на бесконечности, когда левая сторона цепи находится в старом ОС, в то время как правая сторона – в новом ОС.

Хотя полное множество топологических возбуждений является бесконечным (но счетным), все они могут быть сконструированы из нескольких типов “элементарных кинков”. Для нахождения структуры элементарных кинков, давайте рассмотрим целую систему как конструкцию из r подцепочек. Каждая подцепочка, рассмотренная независимо от других подцепочек, имеет тривиальную конфигурацию ОС, то есть элементарная ячейка подцепочки содержит только один атом. Аналогично тому как это было сделано выше, мы можем определить операторы трансляции G_i и T_i , $i = 1, 2, \dots, r$ действующие только на i -тую подцепочку. Любой элемент $S^{(\alpha)}$ полной группы симметрии, $S^{(\alpha)} \in \mathcal{S}$, теперь может быть представлен как произведение элементов подцепочечных подгрупп $\mathcal{G}_i$ и $\mathcal{F}_i$,

$$S^{(\alpha)} = \prod_{i=1}^r G_i^{g_i^{(\alpha)}} \otimes T_i^{t_i^{(\alpha)}}, \quad (11.25)$$

где $g_i^{(\alpha)}$ и $t_i^{(\alpha)}$ являются целыми. Но обратное утверждение не является верным, множество всех произведений $\prod_i G_i^{g_i} \otimes T_i^{t_i}$ превосходит множество $\mathcal{S}$. Действительно, так как подцепочки сильно взаимодействуют, относительное расположение подцепочек в ОС не должно быть нарушено, и это приводит к ограничению на допустимые значения целых чисел $g_i^{(\alpha)}$ в уравнении (11.25). А именно, следующее условие должно выполняться одновременно для всех подцепочек:

$$g_i^{(\alpha)} \bmod p = g^{(\alpha)}, \quad i = 1, \dots, r. \quad (11.26)$$

Если мы будем называть $g_i^{(\alpha)} \bmod p$ как “цвет” i -той подцепи, то условие (11.26) означает, что в ОС все подцепочки должны иметь тот же самый цвет $g^{(\alpha)}$.

Описанным выше способом мы можем сконструировать любое топологическое возбуждение системы. Вспоминая что оператор G_i примененной к правой стороне i -той подцепи, создает подкинк в этой подцепочке (и, аналогично, обратный оператор G_i^{-1} создает под-антикинк), мы видим что любое топологическое возбуждение можно рассмотреть как возбуждение состоящее из соответствующего множества подцепочечных подкинков. Так как ОС изолированной подцепочки является тривиальным и характеризуется безразмерной концентрацией $\theta_i = 1/p$, одиночный под-кинк (под-антикинк) имеет топологический заряд p^{-1} (или $-p^{-1}$). Следовательно, топологическое возбуждение целой системы может быть охарактеризовано топологическим зарядом $Q^{(\alpha)} = q_{\text{tot}}^{(\alpha)}/p$, где

$$q_{\text{tot}}^{(\alpha)} = \sum_{i=1}^r \left(g_i^{(\alpha)} + p t_i^{(\alpha)} \right). \quad (11.27)$$

Таким образом, остается открытым только вопрос, как классифицировать топологические возбуждения, то есть выбор таких возбуждений, которые могут быть рассмотрены как простейшие, или элементарные. Учитывая, что топологические заряды (11.27) являются аддитивными, так что топологический заряд сложного возбуждения является суммой топологических зарядов элементарных возбуждений, нетрудно предположить, что элементарные возбуждения должны соответствовать возбуждениям с минимальными топологическими зарядами, такими как $q_{\text{tot}} = 0$ и 1 или 2.

Из уравнений (11.26) и (11.27) следует что q_{tot} можно представить как

$$q_{\text{tot}} = rg + ph, \quad (11.28)$$

где целые числа r и p соответствуют концентрации θ , цвет g должен быть в пределах интервала

$$1 \leq g < p, \quad (11.29)$$

а h некоторое целое число. Таким образом, задача сводится к поиску таких целых g [из интервала (11.29)] и h , которые минимизируют абсолютное значение q_{tot} определенное уравнением (11.27) для данного $\theta = r : p$. Давайте дальнейшее продолжение разобьем на два шага.

Шаг 1. Предположим что минимум $|q_{\text{tot}}|$ равен единице. В этом случае уравнение (11.28) принимает форму (мы здесь для удобства изменили $h \rightarrow -h$ и положили $q_{\text{tot}} = -1$)

$$ph = 1 + rg. \quad (11.30)$$

Предположим также что r и p являются взаимно простыми, так что уравнение

$$ph = rg \quad (11.31)$$

не имеет решение в целых числах.

Давайте положим p точек на окружность и пронумеруем их, как показано на рис. 11.6, от 0 до $p-1$. Затем, давайте начнем с точки с номером 1, $a_0 = 1$, и сделаем вращение против часовой стрелки, двигаясь “большими” шагами, каждый из r единичных шагов. После того как будет сделан первый оборот в несколько “больших” шагов, мы приходим к точке a'_1 , которая является наиболее близкой к начальной точке a_0 . Вычислим целое

$$s_1 = (p - a_0) \bmod r. \quad (11.32)$$

Если $s_1 = 0$, тогда $a'_1 = 0$ (напомним что точки с номерами p и 0 совпадают) и уравнение (11.30) имеет решение с $h = 1$, в то время как цвет g определяется числом “больших” шагов в течении первого поворота.

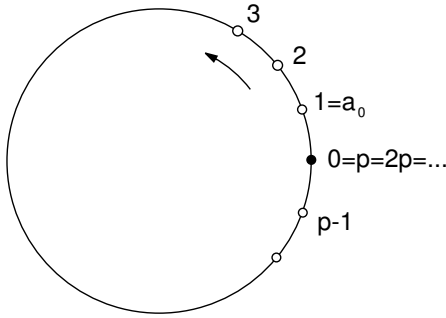


Рис. 11.6. Конструирование элементарного топологического возбуждения.

С другой стороны, если $s_1 \neq 0$, тогда $a'_1 = p - s_1$ и следующая точка в направлении против часовой стрелки $a_1 = r - s_1 \neq a_0$. (Для доказательства неравенства $a_1 \neq a_0$ давайте предположим, что $a_1 = a_0$ и затем получим $r - s_1 = 1$, $(p-1) \bmod r = r-1$, $p-1 = jr + r-1$ (j некоторое целое) и равенство $p = (j+1)r$, которое противоречит предположению что уравнение (11.31) не имеет решения.) Затем, начиная от точки a_1 , после второго поворота мы приходим в точку a'_2 . Вычислим

$$s_2 = (p - a_1) \bmod r. \quad (11.33)$$

Если $s_2 = 0$, то имеем $a'_2 = 0$, так что в уравнении (11.30) $h = 2$. С другой стороны, следующая точка $a_2 = r - s_2$. Снова этим путем можно доказать что $a_2 \neq a_1$ и также что $a_2 \neq a_0$. Таким образом, после каждого оборота мы приходим к новой точке на окружности. Но так как число этих точек конечно (равно p), то после конечного числа шагов мы в конце приходим к точке 0, а число оборотов дает значение h . Таким образом, мы доказали,

что при условии отсутствия решений у уравнения (11.31), уравнение (11.30) всегда имеет решение и показали как найти его.

Шаг 2. Теперь давайте предположим что уравнение (11.31) имеет решение. Легко увидеть что это является справедливым, если и только если p и r имеют общий делитель $j_0 > 1$, то есть если

$$p = p_0 j_0 \quad \text{и} \quad r = r_0 j_0. \quad (11.34)$$

Действительно, представляя произведение $\Pi = ph = rg$ как

$$\Pi = \underbrace{i_1 \dots i_m}_r \underbrace{R i_{m+1} \dots i_n}_g, \quad (11.35)$$

где $i_1, \dots, i_n$ являются простыми целыми. Из (11.35) мы видим, что если r и p не имеют общих делителей, то должно быть $g = Rp$ с $R > 1$, но это запрещается из-за ограничения (11.29).

Пусть j_0 соответствует наибольшему общему делителю. Если мы теперь в уравнении (11.28) положим $g = p_0$ и $h = -r_0$, то мы получим $q_{\text{tot}} = 0$, то есть мы нашли один тип кинков с нулевым полным топологическим зарядом. Положив в уравнении (11.27) $q_{\text{tot}} = 0$ и учтя уравнение (11.26), можно увидеть что элементарные возбуждения должны соответствовать целым $g = p/2$ и $h = r/2$.

Кроме того, в данном случае существуют также решения с ненулевым топологическим зарядом равным $Q = j_0/p$. Их структура может быть найдена из решения уравнения

$$p_0 h = 1 + r_0 g \quad (11.36)$$

подобно тому как это было сделано выше в шаге 1, так как теперь уравнение $p_0 h = r_0 g$ не имеет решения в целых числах.

Суммируя все можно сказать, что когда точечная группа $\mathcal{G}$ не включает оператор инверсии J , так что r и p являются относительно простыми, ОС с $\theta = r:p$ допускает существование единственного типа элементарного топологического возбуждения, кинк СГ-типа с топологическим зарядом $Q = 1/p$. Структура кинка в этом случае может быть найдена из решения уравнения для целых чисел (11.30).

В противном случае, когда r и p не являются относительно простыми и имеют наибольший общий делитель j_0 , ОС с $\theta = r:p$ допускает существование двух типов кинков. Первым является кинк типа ϕ^4 , он имеет топологический заряд $Q = 0$, и его структура характеризуется цветом $g = p/2$. Вторым типом являются кинк СГ типа с топологическим зарядом $Q = j_0/p$, его структура определяется уравнением (11.36). Мы будем называть эти два типа кинков как “немассивный” кинк (NМК) и “массивный” кинк (МК) соответственно, так как транспорт массы (заряда) вдоль цепи может осуществляться только кинками с ненулевым топологическим зарядом, то есть “массивными” кинками. Заметим, что в зигзагообразной модели нет ограничений на последовательность кинков различных типов.

Если мы обозначим через k ($\bar{k}$) подкинк (под-антикинк) в подцепочке, то элементарное топологическое возбуждение K целой системы может быть представлено как набор r элементов, таких как $K = \{g_1 k, g_2 k, \dots, g_r k\}$. Для примера, рис. 5.4 показывает структуру элементарных кинков для тривиального ОС с $\theta = 3:5$. Так как 3 и 5 являются взаимно простыми, то в этом случае мы имеем только один тип кинков, кинк СГ типа с топологическим зарядом $Q = 1/5$. Уравнение (11.30) в этом случае имеет решение для $g = 2$ и $h = 1$, так что структура кинка характеризуется $g_1 = 2$, $g_2 = 2$ и $g_3 = -3$, или $K = \{2k, 2k, 3\bar{k}\}$. Интересно, что эта структура существенно отличается от той, которую можно было бы ожидать из наивного подхода. Действительно, если мы, следуя определению кинка как минимально возможному сжатию цепи, простое сжатие цепи при сдвиге ее правой стороны влево на один период потенциала подложки, мы создаем топологическое возбуждение с топологическим зарядом $Q = 3/5$ и структурой $\{k, k, k\}$, которая затем должен быть расщеплен на три элементарных возбуждения.

Для иллюстрации сделанных выше выводов, давайте опишем кинки для зигзагообразной модели. ЗОС является дополнительно двукратно вырожденным, параметр $j_0 = 2$, и поэтому мы имеем два типа кинков, “массивный” кинк МК = $\{k, k\}$ с $Q = 2/p$ и “немассивный” кинк NМК = $\{k, \bar{k}\}$ с $Q = 0$. В более сложном случае “ромбоидального” ОС, например для $\theta = 3:4$, которое возникает после второй бифуркации, решением уравнения (11.30) будет $h = g = 1$, так что структура кинка $K = \{\bar{k}, 3k, \bar{k}\}$.

Заметим, что все топологические возбуждения с тем же самым топологическим зарядом являются тождественными с топологической точки зрения. Например, “массивный” кинк для ОС “двойной-зигзаг” имеет структуру $K = \{k, k, k, k\}$. Но конфигурации $K = \{k, 5k, 3\bar{k}, k\}$ и $K = \{3\bar{k}, 5k, 3\bar{k}, 5k\}$ также описывают тоже самое топологическое возбуждение. Кроме того, любая подцепочка может содержать дополнительно любое число $k\bar{k}$ пар. Все эти конфигурации являются разными с физической точки зрения, в частности, они могут характеризоваться различными потенциальными энергиями. Один из них соответствует минимуму потенциальной

энергии, другие могут соответствовать локальным минимумам и седловым конфигурациям. Так как конфигурации с тем же самым топологическим зарядом могут быть трансформированы друг в друга непрерывной траекторией, то разработанная выше стратегия помогает искать возможные траектории движения кинка вдоль цепи. Кроме того, вследствие внутренней структуры кинков для сложного ОС, кинки имеют внутренние (“профильные”) моды, которые описывают колебания подкинков относительно друг друга. Заметим также, что подкинки составляющие кинк должны быть пространственно ограничены в области локализации, так как смещение одиночного подкинка из области локализации кинка приводит к увеличению энергии системы линейно с этим смещением. Таким образом, в этом смысле подкинки напоминают кварки теории поля, кинк как элементарная частица сконструирована из кварков.

11.3.4 Кинки зигзаг-модели

Типичная структура массивного кинка и антикинка и немассивного кинка для зигзагообразного ОС с $\theta = 1$ показана на рисунках 11.7–11.8. Для аналитического нахождения параметров кинков, давайте сперва вспомним, что для одномерной модели ФК уравнение движения в континуальном пределе, т.е. при $g \equiv V''_{\text{int}}(a_s) \gg 1$, сводится к уравнению синус-Гордон с коррекционным членом учитывающим ангармоничность межчастичного взаимодействия (для 1D кинков мы используем под-индекс “0”)

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - D_0^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \left(1 - \alpha_0 D_0 \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \sin u = 0, \quad (11.37)$$

где

$$D_0 = 2\pi [V''_{\text{int}}(a_s) + 4V''_{\text{int}}(2a_s)]^{1/2}, \quad (11.38)$$

$$\alpha_0 = -(2\pi/D_0)^3 [V'''_{\text{int}}(a_s) + 8V'''_{\text{int}}(2a_s)]. \quad (11.39)$$

Здесь мы должны были учесть взаимодействие ближайших и следующих соседних соседей с целью позже сделать сравнение с кинками зигзага. Ангармоничность межатомного потенциала разрушает симметрию между кинком и антикинком,

$$m \simeq \frac{4}{\pi D_0} \left(1 - \frac{\pi}{6} \sigma \alpha_0 \right), \quad (11.40)$$

$$\varepsilon_k \simeq \frac{1}{2\pi} \left\{ 8D_0 - 2\pi^2 \sigma [2V'_{\text{int}}(a_s) + V'_{\text{int}}(2a_s)] - \frac{\pi}{3} \sigma \alpha_0 D_0 \right\}. \quad (11.41)$$

Ясно что результаты (11.38)–(11.41) остаются верными для зигзагообразной модели пока ОС остается одномерным.

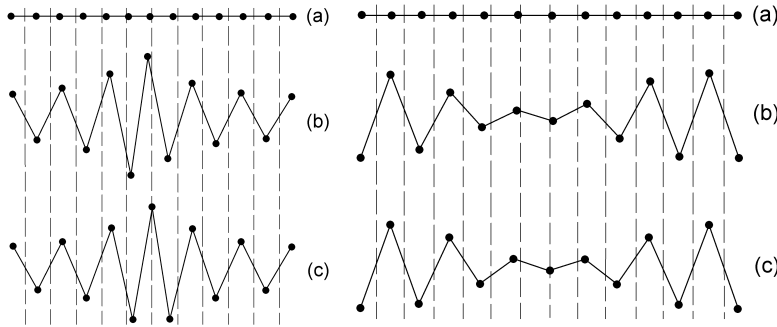


Рис. 11.7. Слева: (a) Одномерный кинк и массивный кинк (b,c) на фоне ЗОС: (b) конфигурация с минимальной энергией и (c) седловая конфигурация. Пунктирная линия показывает положения максимумов подложки. Справа: Тоже самое но для случая массивного антикинка [819].

Для получения подобных уравнений движения для кинков на фоне ЗОС с $\theta = 1$, давайте использовать, следуя работе Брауна с соавторами [819], анзац

$$x_l = l a_s + u_l, \quad y_l = (-1)^l w_l, \quad (11.42)$$

и допустим что значения w_l слегка отличаются от b так, что переменная $z = (w_l + w_{l-1})^2 - 4b^2$ может быть рассмотрена как малый параметр. Дополнительно, предположим что $|u_l - u_{l-1}| \sim z \ll a_s$ и разложим потенциал $V_{\text{int}}(r)$ в ряд Тейлора около $r_0 = \sqrt{a_s^2 + 4b^2}$ до второго порядка по малой переменной z . Тогда приведенный Гамильтониан может быть записан как

$$H = \sum_l \left\{ \frac{1}{2} \dot{x}_l^2 + \frac{1}{2} \dot{y}_l^2 + \frac{1}{2} \omega_{0y}^2 w_l^2 + (1 - \cos u_l) - \frac{1}{2} \pi \omega_{0y}^2 (u_l - u_{l-1}) - \pi \omega_1^2 (u_l - u_{l-2}) - \frac{1}{8} \omega_{0y}^2 (w_l + w_{l-1})^2 + B_1 (u_l - u_{l-1})^2 + B_2 [(w_l + w_{l-1})^2 - 4b^2] (u_l - u_{l-1}) + \frac{1}{8\pi} B_2 [(w_l + w_{l-1})^2 - 4b^2]^2 - \frac{1}{8} \omega_1^2 (w_l - w_{l-2})^2 + \frac{1}{2} g_1 (u_l - u_{l-2})^2 \right\}, \quad (11.43)$$

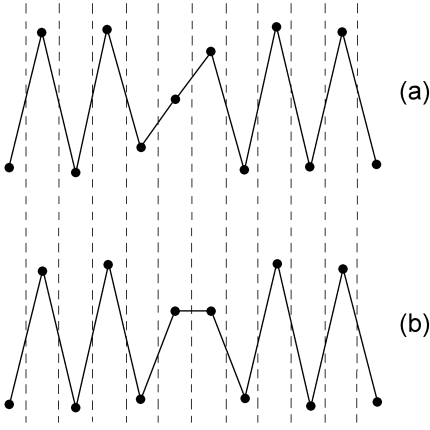


Рис. 11.8. Немассивные кинки на фоне ЗОС: (a) конфигурация с минимальной энергией и (b) седловая конфигурация [819].

где $g = V''_{\text{int}}(r_0)$, $g_1 = V''_{\text{int}}(2a_s)$, $\omega_1^2 = -(2/a_s)V'_{\text{int}}(2a_s)$, $B_1 = r_0^{-2}(4\pi^2 g - \omega_{0y}^2 b^2)$ и $B_2 = (\pi/4r_0^2)(\omega_{0y}^2 + 4g)$. В континуальном приближении, уравнения движения соответствующие гамильтониану (11.43) могут быть записаны в следующей форме ($\tilde{w} = w/b$):

$$-\delta_1^2 \frac{d^2 u}{dx^2} + \sin u = 16\pi B_2 b^2 \tilde{w} \frac{d\tilde{w}}{dx}, \quad (11.44)$$

$$-\delta^2 \frac{d^2 \tilde{w}}{dx^2} - \tilde{w} + \tilde{w}^3 = -\frac{2\pi^2}{b^2} \tilde{w} \frac{du}{dx} - 3\pi^2 \left[\tilde{w}^2 \frac{d^2 \tilde{w}}{dx^2} + \tilde{w} \left(\frac{d\tilde{w}}{dx} \right)^2 \right] \quad (11.45)$$

(мы опустили здесь производные по времени, так как мы интересуемся только статическими свойствами), где $\delta_1^2 = 8\pi^2(B_1 + 2g_1)$ и $\delta^2 = \pi^2 [1 + (\pi/8b^2 B_2)(\omega_{0y}^2 - 4\omega_1^2)]$.

Следовательно, для *продольных* смещений форма кинка описывается возмущенной версией уравнения СГ, в то время как *поперечные* смещения описываются возмущенной моделью ϕ^4 . Действительно, давайте предположим, что в одном направлении кинк отсутствует. Это может быть достигнуто если мы потребуем соответствующие граничное условие в этом направлении и предположим что один из параметров, δ_1 или δ , является малым (в то время как другой будет большим, что является необходимым для континуального приближения). Например, для массивного кинка мы должны взять $\delta \ll \delta_1$ и $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} w(x) = 0$, тогда из уравнения (11.45) мы получим

$$w \simeq b - \frac{\pi^2}{b} \frac{du}{dx} \quad (11.46)$$

(более строгий подход был развит Брауном с соавторами [819]). Соотношение (11.46) остается допустимым до $b \simeq 1$. Подставляя (11.46) в (11.44), мы получим *возмущенное* уравнение СГ (11.37), но теперь с параметрами

$$D = 2\pi \left(4g_1 - \frac{1}{4}\omega_{0y}^2 \right)^{1/2} \quad (11.47)$$

и

$$\alpha = -\frac{1}{D^3} \left[\left(\frac{\pi^2}{b} \right)^2 (\omega_{0y}^2 + 4g) + (4\pi)^3 V'''_{\text{int}}(2a_s) \right] \quad (11.48)$$

вместо D_0 и α_0 , соответственно. Когда α мало можно применить теория возмущения для кинка уравнения СГ и найти приближенное кинковое решение уравнения (11.37)

$$u(x) = 4 \tan^{-1} \exp \left(-\frac{\sigma x}{D} \right) + \frac{4}{3} \alpha \frac{\tan^{-1} [\sinh(x/D)]}{\cosh(x/D)}. \quad (11.49)$$

Когда кинк движется вдоль адиабатической траектории в 2D модели, его эффективная масса определяется, вместо уравнения (5.36) одномерной модели, выражением

$$m(X) = m_a \sum_l \left[\left(\frac{\partial x_l}{\partial X} \right)^2 + \left(\frac{\partial y_l}{\partial X} \right)^2 \right], \quad (11.50)$$

где X координата центра кинка. Используя это определение, мы получим эффективную массу массивного кинка

$$m = \frac{4}{\pi D} \left(1 + \frac{\pi^4}{3D^2 b^3} - \frac{\pi}{6} \sigma \alpha \right). \quad (11.51)$$

Заметим, что это выражение отличается от уравнения (11.40) вторым членом, который появляется из-за *поперечной степени свободы*, он дает главный вклад в массу кинка после ведущего члена и *увеличивает* эффективную массу кинка и антикинка. Аналогично можно вычислить энергию покоя массивного кинка,

$$\varepsilon_k = \frac{1}{2\pi} \left[8D + 2\pi^3 \sigma (\omega_{0y}^2 + 4\omega_1^2) - \frac{\pi}{3} \sigma \alpha D \right]. \quad (11.52)$$

В отличие от случая стандартной модели ФК, где энергии кинка и антикинка были равными, в зигзагообразной модели они отличаются друг от друга. Наиболее существенное отличие в энергиях кинка и антикинка возникает из-за второго члена в уравнении (11.52), то есть в ЗОС для массивных кинков кинк-антикинковая симметрия нарушена, даже если мы будем использовать гармоническое взаимодействие между атомами. Более того, в противоположность одномерной модели с ангармоническим взаимодействием, эффективная ширина кинка будет *меньше* чем ширина антикинка.

Когда в цепи присутствует только немассивный кинк мы должны взять $\delta_1 \ll \delta$ и $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} u(x) = 0$. Тогда из уравнения (11.44) мы имеем $u \simeq 16\pi B_2 b^2 \tilde{w} \tilde{w}_x$, поэтому после изменения переменных $x \rightarrow \delta \tilde{x}$ уравнение (11.45) сведется к возмущенному уравнению ϕ^4

$$-\frac{d^2 \tilde{w}}{d\tilde{x}^2} - \tilde{w} + \tilde{w}^3 = -\gamma \left[\tilde{w}^2 \frac{d^2 \tilde{w}}{d\tilde{x}^2} + \tilde{w} \left(\frac{d\tilde{w}}{d\tilde{x}} \right)^2 \right], \quad (11.53)$$

где параметр $\gamma = (\pi^2/\delta^2)(32\pi B_2 + 3)$ будет достаточно малым при $\delta \gg 1$. Следовательно, для получения приближенной формы кинка мы можем применить теорию возмущения для кинка уравнения ϕ^4

$$\tilde{w} = \sigma \left[\tanh \chi - \frac{\gamma}{2 \cosh^2 \chi} (\tanh \chi - \chi) \right], \quad (11.54)$$

где $\chi = x/\sqrt{2}\delta$. Так как $\gamma \sim 1/\delta^2$, то для немассивного кинка поперечная степень свободы дает такой же вклад в массу кинка и поправочный член в его форму как и для массивного кинка. Используя (11.54) и определение (11.50), мы получим массу кинка

$$m \simeq \frac{\sqrt{2}b^2}{3\pi\delta} \left[1 + \frac{\gamma}{10} + \frac{2}{7} \left(\frac{16\pi B_2 b}{\delta} \right)^2 \right]. \quad (11.55)$$

Если при рассмотрении учесть, что из-за граничных условий интеграл $\int_{-\infty}^{+\infty} dx u_x = 0$, то в континуальном приближении энергию системы (11.43) можно записать в форме

$$E \simeq \frac{4b^4 B_2}{\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[\frac{\delta^2}{2} \left(\frac{d\tilde{w}}{dx} \right)^2 + \frac{1}{4} (1 - \tilde{w}^2)^2 - \frac{\gamma \delta^2}{2} \tilde{w}^2 \left(\frac{d\tilde{w}}{dx} \right)^2 \right], \quad (11.56)$$

так что энергия одиночного кинка

$$\varepsilon_k \simeq \frac{16\sqrt{2}}{3} b^4 B_2 \delta \left(1 - \frac{3}{10} \gamma \right). \quad (11.57)$$

Рисунок 11.9 показывает численные результаты Брауна с соавторами [819] для энергий кинка при изменении частоты поперечного потенциала и фиксированных значениях параметров потенциала взаимодействия [в этих вычислениях вместо Кулоновского взаимодействия было использовано экспоненциальное взаимодействие $V_{\text{int}}(r) = V_0 \exp(-\beta r)$]. Континуальное приближение (сплошные кривые на рис. 11.9) дает достаточно хорошие оценки для МК (кружки) при $\omega_{0y} < \omega_k^*$ и для МК (квадратики) при $\omega_{0y} < \omega^*$ (значение ω^* соответствует бифуркации ТОС, а ω_k^* – бифуркации для цепи с кинком), когда выполнены условия $D \gg 1$ и $\alpha \ll 1$. К сожалению, для НМК аккуратные аналитические оценки возможны только в очень малой области вблизи ω^* , так как аналогичный подход требует малости параметра b , но это последнее условие выполняется только в малой области значений частоты (когда $\gamma \ll 1$).

Когда система находится в контакте с тепловой баней, концентрация термальнорожденных кинков определяется их энергиями, $n_k \propto \exp(-\tilde{\varepsilon}_k/k_B T)$, где $\tilde{\varepsilon}_k = \frac{1}{2}[\varepsilon_k(\text{kinck}) + \varepsilon_k(\text{antikink})]$. Из рис. 11.9 видно что $\tilde{\varepsilon}_k(\text{НМК}) < \tilde{\varepsilon}_k(\text{МК})$. Следовательно, в ЗОС концентрация немассивных кинков намного выше концентрации массивных кинков, $n_k(\text{НМК}) \gg n_k(\text{МК})$, и именно немассивные кинки будут давать основной вклад в *термодинамические* свойства квази-двумерной системы, такие как теплоемкость, свободная энергия, и т.д. Напротив, *динамические* свойства цепи (такие как проводимость, диффузия, и т.д.) определяются массивными кинками.

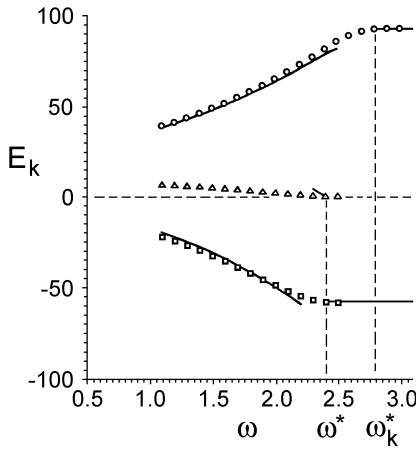


Рис. 11.9. Зависимость энергии кинка от поперечной частоты ω_{0y} для массивного кинка (кружки) и антикинка (квадратики), и для немассивных кинков (треугольники). Использовалось экспоненциальное межузельное отталкивание $[V_{\text{int}}(r) = V_0 \exp(-\beta r)]$ с $V_0 = 200$ и $\beta = 0.3$. Сплошные кривые показывают аналитические результаты [819].

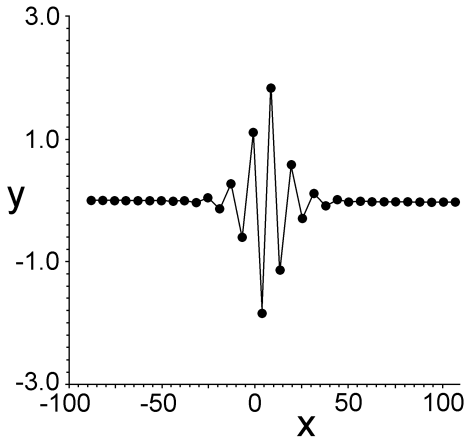


Рис. 11.10. Форма кинка на фоне тривиального основного состояния близкого к точке бифуркации [819].

К сожалению, вблизи точки бифуркации, где $b \ll 1$, аналитический подход перестает работать. В ТОС, но вблизи к точке перехода, структура кинка радикально изменяется: в области ядра кинка, где цепочка является наиболее сжатой, атомы, как показано на рис. 11.10, начинают уходить из минимума потенциала $V_y(y)$. Критическое значение V_0 соответствующее бифуркации в ЗОС является таким, что $V_{\text{bif}}^{(\text{kink})} < V_{\text{bif}}^{(\text{GS})} < V_{\text{bif}}^{(\text{antikink})}$. Для случая кинка, переход ТОС–ЗОС начинается в области ядра кинка (то есть в области локального сжатия цепи) и затем зигзагообразная структура расширяется на всю систему. В противоположность этому, в случае антикинка этот переход заканчивается в области ядра антикинка, который является областью локального растяжения цепочки. Поведение параметров кинка может быть понято в терминах пика средней постоянной упругости $g_{\text{eff}}(V_0)$. В частности, при $V_0 = V_{\text{bif}}^{(\text{GS})}$ область ядра кинка уже трансформирована в зигзагообразное состояние так, что $g_i^{(\text{kink})} < g_i^{(\text{GS})}$. С другой стороны, переход в зигзагообразную форму в области ядра антикинка происходит при большем значении V_0 , так что $g_i^{(\text{antikink})} \sim g_i^{(\text{GS})}$. Так как значение постоянной упругости g определяет параметры топологических возбуждений, таких как эффективная масса кинка m и высота потенциала Пайерлса-Набарро ε_{PN} , то отсюда следует что в точке бифуркации и немного выше ее будет выполняться неравенства $m^{(\text{kink})} > m^{(\text{antikink})}$ и $\varepsilon_{PN}^{(\text{kink})} > \varepsilon_{PN}^{(\text{antikink})}$, которые противоположны аналогичным неравенствам для ТОС.

Результаты численных вычислений ПН барьеров (см рис. 11.11) находятся в согласии с этим качественным рассмотрением. Заметим, что хотя на рис. 11.11 значение ε_{PN} кажется стремится к нулю при $\omega_{0y} > \omega^*$ для $\overline{MK}$ и $\omega_{0y} > \omega_k^*$ для MK , в действительности эти значения для одномерных кинков являются только малыми, но не нулевыми: $\varepsilon_{PN} \simeq 2 \cdot 10^{-4}$ для $\overline{MK}$ и $\varepsilon_{PN} \simeq 5 \cdot 10^{-5}$ для MK , так что $\varepsilon_{PN}(\overline{MK}) > \varepsilon_{PN}(MK)$. Для зигзагообразной структуры кинков ПН барьер для MK больше чем для $\overline{MK}$ в широкой области значений параметра ω_{0y} . Заметим также, что у функции $\varepsilon_{PN}(\omega_{0y})$ присутствует дополнительный максимум связанный с появлением зигзага MK на фоне ТОС.

Зависимость величины ПН барьера для NMK от поперечной частоты показана на рис. 11.11 (b) треугольными маркерами. Напомним, что немассивные кинки существуют при условии $\omega_{0y} < \omega^*$, то есть только для ЗОС. Интересно что функция $\varepsilon_{PN}(\omega_{0y})$ имеет локальный минимум при $\omega_{0y} \simeq 1.31$. Этот эффект аналогичен известному эффекту для несинусоидального потенциала подложки (см. параграф 3.3.3). А именно, для $1.31 < \omega_{0y} < \omega^*$ минимум потенциальной энергии реализуется при конфигурации показанной на рис. 11.8(a), в то

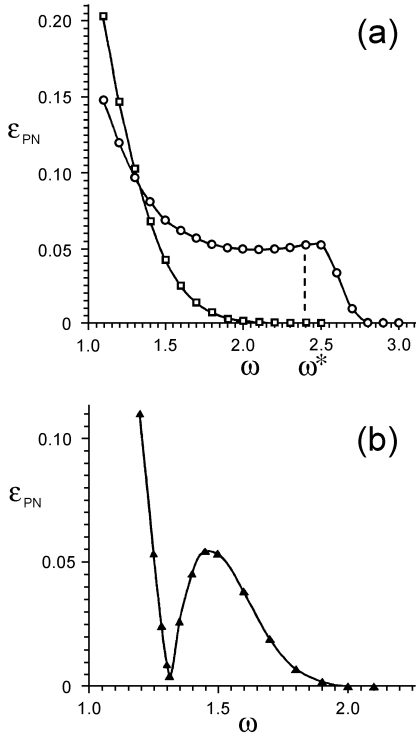


Рис. 11.11. Зависимость высоты барьер Пейерлса-Набарро от поперечной частоты ω_{0y} для (а) массивного кинка (окружности) и антикинка (квадратики) и (б) немассивного кинка (треугольники) для экспоненциального взаимодействия $[V_{\text{int}}(r) = V_0 \exp(-\beta r)]$ с $V_0 = 200$ и $\beta = 0.3$ [819].

время как конфигурация представленная на рис. 11.8(b) соответствует седловому состоянию. Однако, при $1 < \omega_{0y} < 1.31$ ситуация противоположна: конфигурация показанная на рис. 11.8(a) соответствует седловому состоянию, в то время как конфигурация показанная на рис. 11.8(b) – конфигурации с минимальной энергией. Более того, вблизи значения $\omega_{0y} = 1.41$ обе эти конфигурации соответствуют локальному максимуму энергии, в то время как конфигурация с минимальной энергией реализуется на некоторой промежуточной конфигурации.

Существование поперечной степени свободы отражается в качественном изменении зависимости коэффициента диффузии от концентрации атомов. Напомним, что коэффициент химической диффузии D_c совпадает с коэффициентом диффузии антикинка если концентрация атомов θ немного ниже значения $\theta = 1$, $D_c(\theta)|_{\theta=1-0} = D_c^- = D_{\bar{k}}$, так как в этом случае транспорт массы вдоль цепи осуществляется антикинками. Иначе, когда $\theta = 1 + 0$, транспорт массы осуществляется кинками, и $D_c(\theta)|_{\theta=1+0} = D_c^+ = D_k$. Пока конфигурация цепи остается одномерной, параметр ангармонизма α_0 остается положительным и $\varepsilon_{PN}(\text{antikink}) > \varepsilon_{PN}(\text{kink})$. Так как $D_k \propto \exp(-\varepsilon_{PN}/k_B T)$, то это приводит к неравенству $D_c^- < D_c^+$. Таким образом, функция $D_c(\theta)$ скачкообразно увеличивается при $\theta = 1$. Однако, в зигзагообразной ФК модели силы отталкивания между соседними атомами в области кинка могут превосходить силы которые удерживают атомы в одномерной линии. В этом случае атомы начинают уходить от этой линии и кинк становится менее мобильным чем антикинк, т. е. $D_c^- > D_c^+$, так что скачок в функции $D_c(\theta)$ при $\theta = 1$ меняет свой знак. Как видно из рис. 11.11, массивный антикинк на зигзаге (вакансия) является более подвижным чем массивный кинк (добавочный атом в цепи) для широкой области значений ω_{0y} .

11.3.5 Приложения

Для оценки значения поперечной частоты ω_{0y} в реалистичных физических системах, мы можем допустить, что в кристалле функция $V_y(y)$ получается из периодического потенциала $V_y(y) = \frac{1}{2}\varepsilon_{sy}[1 - \cos(2\pi y/a_{sy})]$, где ε_{sy} является его амплитудой, а a_{sy} – периодом поперечного потенциала. Для этой формы функции $V_y(y)$ мы получаем $\omega_{0y}^2 = V_y''(0) = 2\pi^2\varepsilon_{sy}/a_{sy}^2$. Для ионов с единичным элементарным зарядом e , в уравнении (11.14) величина $V_0 = e^2$. Затем, положив в уравнении (11.22) $a_A = a_s/\theta$, мы найдем, что бифуркация ТОС–ЗОС происходит когда θ достигает порогового значения

$$\theta_{\text{bif}} = \left[\frac{\pi^2}{2} \left(\frac{a_s}{a_{sy}} \right)^2 \frac{\varepsilon_{sy}}{e^2/a_s} \right]^{1/3}. \quad (11.58)$$

Учитывая, что $a_s \sim a_{sy} \sim 3\text{\AA}$ и $\varepsilon_{sy} \sim 0.1$ эВ, мы получим оценку $\theta_{\text{bif}} \sim 0.5$. Такое значение может легко достигаться в реальных системах таких как атомы в канале суперионного проводника или протоны в цепочке

водородных связей. Таким образом, обычная картина остающихся на одной линии ионов в канале является сверх упрощенной, возможность движения ионов в поперечных направлениях должна существенно изменить некоторые выводы полученные в рамках стандартной модели ФК, например это относится, как показано в параграфе 11.3.2, к существованию скользящей моды.

Учет поперечных степеней свободы очень важен в моделировании адсорбции слоев и изучении краудионов. В частности, происходящий с увеличением концентрации атомов переход ТОС–ЗОС резко уменьшает подвижность топологических дефектов в этой системе и, в силу этого, изменяет зависимости подвижности и коэффициентов диффузии от концентрации, как было показано в параграфе 11.3.4.

Для приложения к адсорбируемым системам, зигзагообразная модель должна быть обобщена далее. *Первое*, если поперечная степень свободы описывает смещения атомов перпендикулярно к поверхности, этот потенциал не может более рассматриваться как параболический. Когда атом уходит от поверхности, поперечный потенциал стремиться к постоянному значению, соответствующему "вакуумному уровню" атома ушедшего от поверхности. Так как потенциал должен иметь минимум вблизи поверхности для того чтобы описать прилипание сверхслоя к подложке, то поперечный потенциал должен быть невыпуклым. Например, потенциал перпендикулярный к поверхности может быть взят в форме потенциала Морзе

$$V_y(y) = \varepsilon_d (e^{-\gamma y} - 1)^2, \quad (11.59)$$

который стремится к конечному пределу ε_d (известному как энергия адсорбции) при $y \rightarrow \infty$. Параметр γ определяет ангармоничность, он связан с частотой колебания уединенного атома в ортогональном направлении ω_{0y} соотношением $\omega_{0y}^2 = 2\gamma^2 \varepsilon_d / m_a$. В отличие от параболического потенциала, функция (11.59) является невыпуклой, она имеет точку перегиба при $y = y_{\text{inf}} \equiv \gamma^{-1} \ln 2$, так что $\omega_{\text{eff}}^2(y) \equiv V_y''(y) > 0$ для $y < y_{\text{inf}}$, но $\omega_{\text{eff}}^2(y) < 0$ при $y > y_{\text{inf}}$. Кроме того, полная потенциальная энергия уединенного атома вблизи подложки теперь может быть записана как

$$V_{\text{sub}}(x, y) = V_x(x)e^{-\gamma' y} + V_y(y). \quad (11.60)$$

Экспоненциальный множитель в первом члене правой стороны уравнения (11.60) учитывает убывание влияния гофрирования поверхности при удалении атома от поверхности, так что $V_{\text{sub}}(x, y) \rightarrow \varepsilon_d$ когда $y \rightarrow \infty$.

Экспоненциальный множитель $\exp(-\gamma' y)$ в уравнении (11.60) вводит связь между смещениями x и y . В результате, атомы которые смещены от минимума потенциала подложки в направлении x , должны дополнительно принуждаться к поперечному движению. Легко увидеть, что если атом вдоль цепи сдвинуть на Δx ($\Delta x < \frac{1}{2}a_s$) от соответствующего минимума $V_{\text{sub}}(x, y)$, то это приводит к действию силы в направлении y , которое сдвигает его в ортогональном направлении на величину

$$\Delta y \approx \frac{1}{2}\gamma' \left(\frac{\omega_{0x}}{\omega_{0y}} \right)^2 (\Delta x)^2. \quad (11.61)$$

Следовательно, субмонослойная структура адсорбированных атомов при $\theta \neq 1$, которую можно рассмотреть как суперструктуру кинков или антикинков с периодом $a_\theta = a_s / |1 - \theta|$, должна быть гофрирована в ортогональном направлении с тем же самым периодом a_θ .

Второе, потенциал взаимодействия должен содержать обе отталкивающие и притягивающие ветви как, например, потенциалы Леннарда-Джонса или Морса, поэтому он тоже должен быть невыпуклым. Зигзагообразная модель обобщенная таким образом, может быть использована для качественного объяснения поведения адсорбированных систем с более чем одним монослоем. А именно, с увеличением концентрации атомов, атомы начинают образовывать вначале одномерные цепочки в минимумах $V_y(y)$, которые соответствует "первому монослою" адсорбированной пленки. Однако, когда первый слой становится полным, дальнейшее увеличение θ будет приводить к конфигурациям атомов в которых новые атомы имеют $y > y_{\text{inf}}$ и они начинают образовывать "второй монослой". Как было показано Брауном и Пейраром [820], при некотором тонком, но реалистическом выборе параметров модели, атом при $\theta \sim 1$ может иметь два устойчивых положения, одно соответствующее атому вставленному в первый слой, и другое с этим атомом в втором слое. Таким образом, модель может демонстрировать следующий "сценарий реконструктивного роста": при $\theta \leq 1$ атомы заполняют первый слой, в то время как при $\theta > 1$ новые входящие атомы занимают второй слой. Однако, когда концентрация θ увеличивается выше некоторого порогового значения $\theta = \theta'$, входящие атомы продолжают заполнять второй слой, но в то же самое время, они стимулируют переход атомов из основного первого слоя во второй слой, вызывая реконструкцию структуры растущей пленки. Затем при $\theta'' < \theta \leq 2$ (где θ'' – второе пороговое значение) ушедшие атомы задерживаются обратно первым слоем и пленка продолжает расти обычным способом, новые поступающие атомы помещаются поверх полностью заполненного первого слоя. Таким образом, в пределах интервала $\theta' < \theta < \theta''$ структура ОС соответствует частично заполненному первому слою, в то время как при $1 \leq \theta < \theta'$ и при $\theta'' < \theta < 2$ в ОС первый слой полностью заполнен. Такая последовательность структур адсорбированных атомов наблюдалась в экспериментах для литиевой пленки растущей на поверхности (112) вольфрама и молибдена [821, 822].

Та же самая модель была также использована Брауном с соавторами [823] для описания механизма “солитонно-объемной” диффузии. Когда первый адсорбируемый слой оказывается заполненным и новые поступающие атомы начинают заполнять второй адслой, диффузия во втором слое подчиняется обычно тем же самым законам как в первом слое, так как адатомы первого монослоя играют такую же роль как и атомы подложки для диффузии адатомов первого слоя (адатомы первого слоя создают внешний потенциал для атомов второго слоя). Однако, для модели описанной выше ситуация является более сложной из-за обмена атомов между первым и вторым адслоями. Как было описано выше, в некоторой области параметров модели возможно формирование метастабильных дефектов в которых атом второго слоя проникают внутрь первого слоя. В этой метастабильной конфигурации внешний атом создает локализованное солитонное возбуждение (кинк), который обычно имеет очень высокую подвижность. Таким образом, даже если время жизни метастабильной конфигурации при ненулевой температуре мало, она может играть главную роль в результирующей поверхностной диффузии, создавая необычную температурную зависимость коэффициента диффузии. Такой диффузионный механизм является *двух-ступенчатым обменным* механизмом диффузии. Главное его отличие от одно-ступенчатой обменной диффузии состоит в том, что конфигурация с адатомом вставленным в первый адслой, теперь соответствует *метастабильному* состоянию вместо неустойчивого (седлового) состояния как это обычно происходит в обменном механизме. Для этого “обменно-солитонного” механизма диффузия при низких температурах подчиняется закону Аррениуса с энергией активации соответствующей теперь разнице энергий между метастабильным состоянием и основным состоянием (а не барьеру для перехода из второго адслоя в первый), в то время как предэкспоненциальный множитель определяется коэффициентом диффузии кинка и существенно зависит от температуры. Подобное поведение было обнаружено Блэком и Тианом [824] в молекулярно динамических экспериментах, в которых изолированный адатом Cu, диффундирующий по поверхности Cu(100) мог войти в первый слой подложки и создать в нем напряжение вдоль плотно-упакованного ряда. Это локализованное возбуждение (краудин) движется вдоль ряда на расстояние нескольких постоянных решетки, а затем напряжение уменьшается за счет выдавливания и возвращения на поверхность атома из напряженного ряда. Моделирование показало, что этот механизм диффузии становится важным при достаточно высоких температурах ($T \sim 900$ K для адсистемы Cu-Cu(100)).

11.4 Двухмерная векторная модель пружинки-шарики

В общей двухмерной (2D) модели ФК атомы могут двигаться в обоих направлениях, так что с каждым атомом связан с переменной векторного поля $\mathbf{u}_{l_x, l_y} \equiv \{u_{l_x, l_y}^x, u_{l_x, l_y}^y\}$. Векторные модели вплотную связаны с реалистичными физическими объектами, с таким как слои атомов адсорбированных на кристаллических поверхностях. В общем случае, мы теперь должны учесть взаимодействие между всеми атомами в системе. Однако, если мы хотим упростить модель, учтя только взаимодействие малого числа ближайших соседей, то мы должны ограничиться рассмотрением только конфигураций с малыми смещениями атомов в соответствующих элементарных ячеек.

Таким образом, модельный Гамильтониан для реалистичной 2D векторной модели ФК принимает форму $H = K + U_{\text{int}} + U_{\text{sub}}$, где кинетическая энергия K тривиально обобщается

$$K = \frac{m_a}{2} \sum_l |\dot{\mathbf{u}}_l|^2. \quad (11.62)$$

Для простоты предположим, что взаимодействие между атомами является изотропным, т. е.

$$U_{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum_{l \neq l'} V_{\text{int}}(|\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_{l'}|), \quad (11.63)$$

где $\mathbf{r}_l$ координата атома, а $V_{\text{int}}(r)$ парный потенциал который в простейшем случае может быть приближен гармонической функцией (*модель пружинки и шарики*). Потенциальная энергии подложки

$$U_{\text{sub}} = \sum_l V_{\text{sub}}(\mathbf{r}_l), \quad (11.64)$$

где $V_{\text{sub}}(\mathbf{r})$ описывает симметрию подложки (для примера, потенциал создаваемый первым поверхностным слоем подложки в случае адсорбируемых пленок). В частности, для подложки с прямоугольной подложкой с элементарной ячейкой $a_{sx} \times a_{sy}$ функция $V_{\text{sub}}(x, y)$ может быть промоделирована как

$$V_{\text{sub}}(x, y) = \frac{\varepsilon_x}{2} V_s(2\pi x/a_{sx}) + \frac{\varepsilon_y}{2} V_s(2\pi y/a_{sy}) + \frac{1}{4} (\varepsilon_{\text{max}} - \varepsilon_x - \varepsilon_y) V_s(2\pi x/a_{sx}) V_s(2\pi y/a_{sy}), \quad (11.65)$$

где $\varepsilon_{\max}$ – максимум 2D потенциала, ε_x и ε_y являются (седловыми) энергиями активации движения в направлениях x и y , а $V_s(x)$ является соответствующей периодической функцией нормализованной условиями $V_s(0) = 0$ и $V_s(\pi) = 2$, например, $V_s(x) = 1 - \cos x$. Для квадратной решетки, такой как поверхность (100) кубических кристаллов, мы можем положить $a_{sx} = a_{sy} = a_s$ и $\varepsilon_x = \varepsilon_y = \varepsilon_s$, в то время как для изоборожденных поверхностей, таких как поверхность (112) б.с.с. кристаллов мы должны взять $a_{sx} < a_{sy}$ и $\varepsilon_x < \varepsilon_y$.

Треугольные решетки подложки могут быть построены подобным способом,

$$V_{\text{sub}}(x, y) = \frac{1}{2}\varepsilon \left\{ 1 - \cos(2\pi x/a_{sx}) \cos(\pi y/a_{sy}) + \frac{1}{2} [1 - \cos(2\pi y/a_{sy})] \right\}, \quad (11.66)$$

где выбор $a_{sy} = a_{sx}\sqrt{3}/2$ приводит к треугольной симметрии минимумов потенциала разделенных изотропными энергетическими барьерами высоты ε . Частоты колебаний атомов вблизи минимума в этом случае тоже изотропны, частота $\omega_{0x} = \omega_{0y} = (\varepsilon/2m)^{1/2}(2\pi/a_{sx})$. Потенциал (11.66) может быть представлен как $V_{\text{sub}}(x, y) = \frac{1}{4}\varepsilon [3 - \cos(\mathbf{k}_1\mathbf{r}) - \cos(\mathbf{k}_2\mathbf{r}) - \cos(\mathbf{k}_1\mathbf{r} + \mathbf{k}_2\mathbf{r})]$, где $\mathbf{r} = (x, y)$, и $\mathbf{k}_1$ и $\mathbf{k}_2$ являются обратными векторами треугольной решетки. Подобная форма потенциала часто используется в изучении атомных слоев адсорбированных на изотропных треугольных или гексагональных подложках [825, 826].

Для классификации различных топологических возбуждений векторной 2D модели ФК, удобно рассмотреть сперва единственную цепочку атомов помещенную в двухмерный потенциал подложки. Когда целая цепочка лежит в зоне некоторого “канала” 2D потенциала, то есть если $u_1^y = 0$ при $l_x \rightarrow \pm\infty$ но $u_1^x = 0$ при $l_x \rightarrow -\infty$ и $u_1^x = \pm a_{sx}$ при $l_x \rightarrow \infty$, то такое топологическое возбуждение называется *узловым* кинком (ek). С другой стороны, когда концы цепочки лежат в различных соседних долинах потенциала, то есть $u_1^x = 0$ при $l_x \rightarrow \pm\infty$, но $u_1^y = 0$ при $l_x \rightarrow -\infty$ и $u_1^y = \pm a_{sy}$ при $l_x \rightarrow \infty$, то такое топологически устойчивое возбуждение называется *винтовым* кинком (sk). Винтовые кинк и антикинк имеют те же самые параметры, так как они оба соответствуют локальному растяжению межатомных связей. Обычно, $\varepsilon_k(\text{ek}) > \varepsilon_k(\text{sk})$, но $\varepsilon_{PN}(\text{ek}) < \varepsilon_{PN}(\text{sk})$.

Теперь давайте рассмотрим двумерный массив атомов как систему параллельных цепочек атомов. Если только одна из цепочек содержит дополнительный атом, такая конфигурация называется *краудионом*. Но когда каждая цепочка содержит один кинк и кинки лежащие в ближайших соседних цепочках притягивают друг друга, они образуют дислокационную линию (доменную стенку, линейный солитон, и т.д.). В зависимости от типа кинков, дислокации могут быть либо узлового, либо винтового типа. Заметим, что узловая дислокация подобна доменной стенке скалярной модели ФК рассмотренной выше в параграфе. 11.2.

В общем случае дислокации могут быть охарактеризованы вектором Бюргерса (см., например, книгу [827]). Если $\mathbf{u} \equiv (u^x, u^y)$, то вектор Бюргерса определяется как

$$\mathbf{b} \equiv \oint_C \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial l} dl, \quad (11.67)$$

где интеграл берется по замкнутому контуру C . Если контур не содержит дислокаций, $\mathbf{b} = 0$. Если контур содержит дислокацию, то вектор $\mathbf{b} \neq 0$. Для винтовой дислокации вектор $\mathbf{b}$ параллелен дислокационной линии, в то время как для узловой дислокации $\mathbf{b}$ перпендикулярен линии. В общем случае, дислокация имеет обе узловые и винтовые компоненты.

11.4.1 Основное состояние

В случае гармонического межатомного потенциала, кинки в ближайших соседних цепях взаимодействуют друг с другом, формируя цепочки кинков, или доменные стенки. Давайте рассмотрим вначале основное состояние при $T = 0$ в случае фиксированной плотности. Когда $\theta = 1$, то есть число атомов равно числу минимумов потенциала $V_{\text{sub}}(\mathbf{r})$, основное состояние будет тривиальным, все атомы лежат в минимумах $V_{\text{sub}}(\mathbf{r})$. Если $\theta \neq 1$, но нагрузка приложена только в одном направлении (а именно, периодические граничные условия выглядят как $\mathbf{u}_{l_x+N_x, l_y} = \mathbf{u}_{l_x, l_y} + N_w \mathbf{b}$ и $\mathbf{u}_{l_x, l_y+N_y} = \mathbf{u}_{l_x, l_y}$), ОС содержит N_w параллельных доменных стенок. Эта ситуация подобна рассмотренной выше скалярной 2D модели ФК. Однако, если $\theta \neq 1$ и напряжение приложено в обоих направлениях, ОС будет соответствовать пересеченной сетке дислокаций.

Сниман и Сниман [828] численно исследовали ОС для гексагонального потенциала подложки, моделируя эпитаксиальную структуру монослоя на поверхности (111) ф.с.с. металла. Симметрии потенциала подложки и монослоя “пружинки-и-шарики” показаны на рисунках 11.12(а,б). Компьютерная структура монослоя для 4% естественного несоответствия представлена на рис. 11.13, где показаны четыре единичные ячейки. Два типа островов “когерентных” адатомов образуются отдельно друг от друга, разделенные полосами смещенных атомов. Эти компьютерные результаты прекрасно совпадают с предсказаниями теории упругости дислокаций.

Исследование растущих слоев с прямоугольной граничной симметрией является более сложной задачей, так как простая модель пружинки-и-шарики является неустойчивой относительно сдвиговых деформаций. Следовательно, модель должна быть улучшена дополнительным учетом взаимодействия следующих ближайших

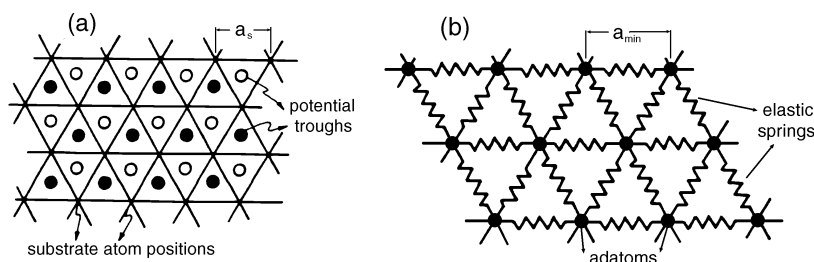


Рис. 11.12. (а) Симметрия потенциала подложки, и (b) модель растущей пленки из пружинки и шариков для гексагональной граничной симметрии [828].

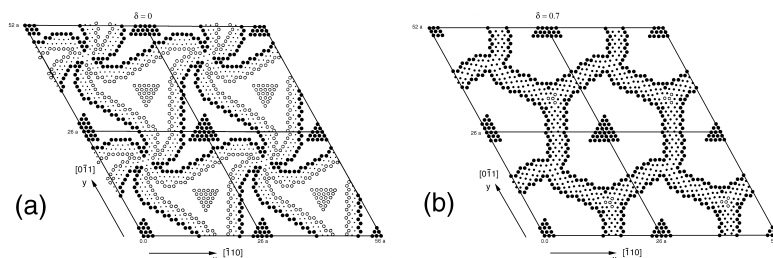


Рис. 11.13. Компьютерные структуры монослоя для $(a_{\min} - a_s)/a_s = 0.04$ и различных значений δ : (а) $\delta = 0$, и (b) $\delta = 0.7$. Заполненные окружности показывают адатомы в правильных положениях, а пустые окружности обозначают атомы занимающие неправильные положения. Точки обозначают смещенные атомы с переходными положениями между правильными и неправильными локализациями. [828].

(диагональных) соседних атомов. Соответствующие постоянные упругости должны быть выбраны так, чтобы удовлетворять требованиям теории упругости для корректного определения модулей сдвига и отношения Пуассона. Компьютерные моделирования [768, 829] в согласии с предсказаниями теории упругости показали что несоответствие обеспечивается крестовой прямоугольной сеткой узловых дислокаций. Аналогично, молекулярно динамическое моделирование для подложки с гексагональной симметрией предсказывает образование сотовой сети доменных стенок [830].

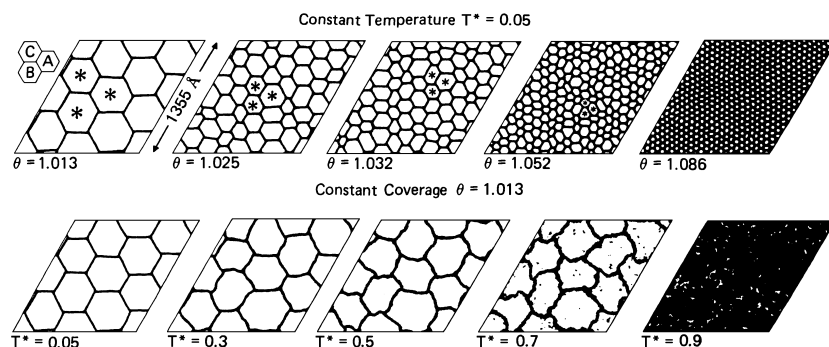


Рис. 11.14. Молекулярно динамические картинки сети доменных стенок для равновесных конфигураций как функция концентрации θ при фиксированной температуре $T = 0.05$ и как функция температуры при фиксированной концентрации $\theta = 1.013$ для 103041 атомов **Kr** взаимодействующих через Леннард-Джонсовский потенциал и адсорбированных на графите [830].

Теоретическое исследование конфигураций ОС при малом значении параметра несоответствия показывает, что важным параметром системы является энергия $\varepsilon_{\text{cross}}$ пересечения доменных стенок. Если взаимодействие стенок является энергетически выгодным ($\varepsilon_{\text{cross}} < 0$), то сеть доменных стенок должна создаваться разрывным фазовым переходом при возрастании несоответствия [831]. С другой стороны, если $\varepsilon_{\text{cross}} > 0$, теория предсказывает, что в начале должна возникать полосатая фаза, когда доменные стенки ориентированы только в одном направлении [807, 832], и только позже с дальнейшим возрастанием несоответствия возникает сетка доменных стенок. Здесь оба фазовых перехода непрерывны.

Теперь давайте кратко обсудим основное состояние при $T \neq 0$. Полосатая решетка доменных стенок плавится так же как в скалярной модели ФК. Плавление сотовой сетки было исследовано Абрахамом с соавторами [830] с

помощью молекулярной динамики. Моделирование показало, что с ростом температуры, искажение идеальной сотовой структуры становится более распространенным, характеризуется значительными флуктуациями от направлений симметрии, утончением стенок и появления у них шероховатости (см. рисунки 11.14). Бак и соавторы [831] сделали попытку аналитического решения этой задачи (см. также работы [48, 503, 833] и приведенные в них ссылки).

Наконец, при большом несоответствии между подложкой и слоем, образуются однородные несоразмерные структуры. При возрастании покрытия θ угол между подложкой и адатомной структурой может резко меняться через разрывные фазовые переходы [834, 835]. Однако, когда температура изменяется, но значение θ остается фиксированным, фазовые переходы могут быть непрерывными [836].

11.4.2 Спектр возбуждений

Аналогично одномерному случаю, при достаточно слабом межатомном взаимодействии двухмерная модель ФК имеет бесконечное число метастабильных состояний (конфигурационных возбуждений). Эти конфигурации могут быть снова рассмотрены в рамках стандартного отображения, то есть как траектории некоторой искусственной динамической системы с, однако, двумя дискретными “временами” l_x и l_y (заметим что эволюция по одной “временной” переменной зависит от эволюции по другой). Большинство этих конфигурационных возбуждений являются пространственно хаотическими. Аппроксимируя потенциал подложки кусочно гармонической функцией, энергию конфигурации можно вычислить с помощью метода функции Грина. Затем можно вычислить плотность метастабильных конфигураций и их вклад в теплоемкость. Эта программа была детально разработана Ухлером и Шиллингом [837] для прямоугольной ФК модели пружинки-и-шарики. Результаты объяснили стекло-подобное поведение системы без собственного беспорядка.

Блэк и Милс [838] исследовали при помощи молекулярно динамической техники спектр фононов двухмерной модели ФК.

11.4.3 Динамика

Ломдаль и Селовиц [839, 840] изучили динамические свойства векторной ФК модели пружинки-и-шарики с помощью метода молекулярной динамики. Авторы решили уравнения движения Ланжевена для прямоугольной 30×30 модели ФК с $\theta = 1$ как фоновой структурой. Для начальной конфигурации они взяли решетку с одной узловой или одной винтовой дислокационной линией, и затем исследовали эволюцию системы под действием внешней постоянной силы (или сдвигового напряжения, так как сила применена только к “адатомам”). Были выбраны следующие параметры модели $\varepsilon_k(\text{ek})/\varepsilon_k(\text{sk}) \approx 7$ и $\varepsilon_{\text{PN}}(\text{ek})/\varepsilon_{\text{PN}}(\text{sk}) \approx 10^{-5}$, которые близки к нормальным условиям для кристаллов. Движущая сила имела две компоненты, $\mathbf{F} = (F_x, F_y)$. Полученные результаты суммируются в следующем:

(i) При $T \neq 0$ дислокационные линии под действием тепловых колебаний становятся, как и в скалярной модели, шероховатыми. Эта шероховатость возрастает с ростом температуры, но уменьшается с увеличением скорости дислокации. Винтовая дислокация имеет относительно меньшие шероховатости (из-за большего ПН барьера) по сравнению с узловой дислокацией;

(ii) Из-за неравенства $\varepsilon_{\text{PN}}(\text{sk}) \gg \varepsilon_{\text{PN}}(\text{ek})$, винтовая дислокация движется более медленно чем узловая дислокация. Движение винтовой дислокации является термически активированным, ее скорость контролируется величиной термического образования кинк-антикинк-пар. Кинки на винтах являются узлами и следовательно после рождения они двигаются вдоль винта с большой скоростью из-за малости ПН барьеров;

(iii) Двигающиеся дислокация тормозится из-за внутреннего трения, обусловленного излучением фононов. Двигающаяся угловая дислокация излучает продольные фононы, то есть фононное поле имеет ту же самую компоненту как и вектор Бюргерса. Однако, движущаяся винтовая дислокация излучает фононы в обоих полях, высокочастотные поперечные фононы (в поле вектора Бюргерса) и низкочастотные, более мало амплитудные слабо затухающие продольные фононы в поле ортогональном к $\mathbf{b}$;

(iv) Проверка временной эволюции первоначально круговой дислокационной петли показывает, петля расширяется в асимметричной форме: узловые компоненты двигаются более быстрее чем винтовая компоненты, так как это и следует ожидать из неравенства $\varepsilon_{\text{PN}}(\text{sk}) \gg \varepsilon_{\text{PN}}(\text{ek})$;

(v) Для выбранных параметров модели термическое рождение дислокаций (дислокационных петель) является несущественным. Однако, позади двигающейся узловой дислокации, рождаются малые дислокационные петли с тем же самым вектором Бюргерса как начальная прямая дислокация [рис. 11.15(b)]. Эти петли продолжают расти до столкновения [рис. 11.15(c)]. При столкновении петли теряют свою идентичность и объединяются в прямые дислокации [рис. 11.15(d)]. Сформированная таким образом прямая дислокация близка к начальной дислокации и имеет тот же самый вектор Бюргерса. Эти две дислокации двигаются по кристаллу как единая дислокация с двойным вектором Бюргерса. Образование зародышей петель происходит из-за кооперативного взаимодействия между фононами излучаемыми двигающейся дислокацией и тепловыми фононами.

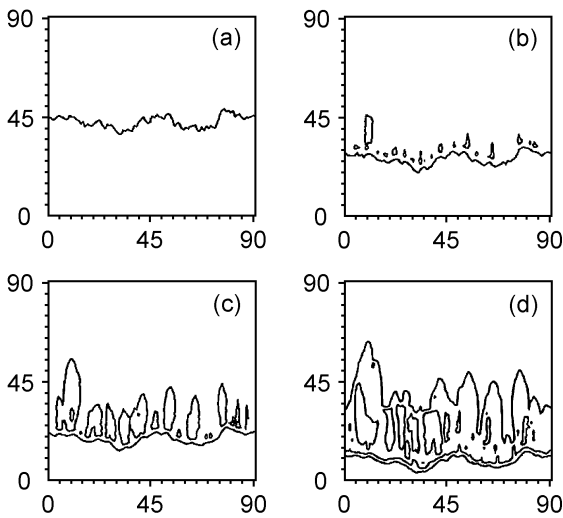


Рис. 11.15. Генерация дислокаций позади узловой дислокации движущейся под действием приложенной силы $F_x = 0$, $F_y = 0.175$ и $k_B T = 0.15$ при $t = 0, 20, 30$, и 40 , соответственно [840].

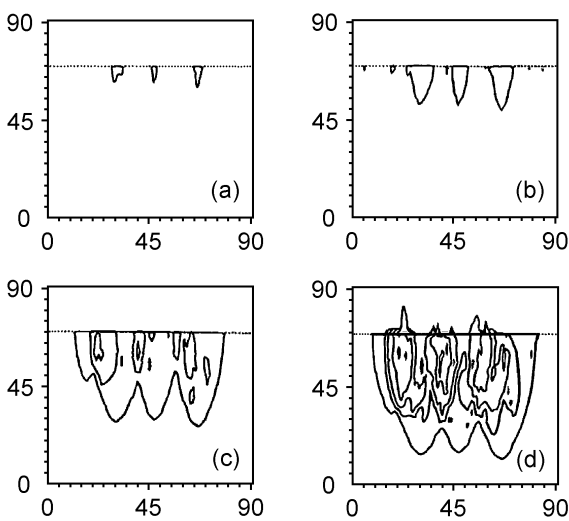


Рис. 11.16. Генерация дислокаций на стационарной узловой дислокации (пунктирная линия). Приложенная сила имеет компоненты $F_x = 0$, $F_y = 0.175$, постоянная температура $k_B T = 0.15$. Показана картина при временах 17.5 (a), 30 (b), 55 (c), и 70 (d). Сплошные кривые соответствуют дислокациям с вектором $\mathbf{b} = (0, a_s)$ [840].

Кроме того, была обнаружено образование зародышей дислокационных петель на неподвижной винтовой дислокации (закрепленной на ПН потенциале) в присутствии приложенной силы (рис. 11.16). В то время как эти петли растут и смещаются, рождаются еще дополнительные петли. Образование зародышей дислокационных петель на винтовой дислокации происходит более легко чем внутри объема, так как у конкретной винтовой/узловой дислокации энергия расположенной рядом винтовой/узловой дислокации понижается по сравнению с отдаленными дислокациями. Таким образом однородное образование зародышей дислокационных петель обычно является невыгодным, такое гетерогенное образование зародышей может происходить при достаточно высоком напряжении. При низких напряжениях, однако, дислокации могут создаваться такими хорошо известными механизмами, как источники Франка-Рида, поперечное проскальзывание и т.д.

Наконец, мы должны вспомнить работу Горностырева с соавторами [841], в которой была исследована ланжевеновская динамика модели пружинки-и-шарики для случая треугольного потенциала подложки.

11.5 Векторная 2D ФК модель

Поведение *анизотропной* истинно-векторной 2D модели ФК почти идентично поведению 1D модели ФК [190], так как она ведет себя подобно рассмотренной выше в параграфе 11.2 скалярной 2D модели ФК. Единственное отличие состоит в переходе к конечному скользящему состоянию. Точная критическая сила слабо зависит от внешних условий, это значит что переходы не происходят одновременно во всех каналах. Когда один канал перешел в скользящее состояние, это из-за межатомных взаимодействий увеличивает вероятность перехода соседних каналов. Следовательно этот первый канал выполняет роль зародыша. С другой стороны, переход канала из скользящего состояния в замкнутое почти не зависит от соседних каналов [190].

Основное состояние и статистическая механика *изотропной* 2D модели ФК могут быть с хорошей точностью описаны моделью пружинки-и-шарики (см. параграф. 11.4). Нелинейная динамика изотропной модели, однако, должна быть рассмотрена в рамках истинно-векторной 2D модели, так как взаимные смещения атомов могут быть тоже большими. К сожалению, исследование изотропной векторной 2D системы ФК с трением является очень ограниченным и до сих пор имеются открытые вопросы, в частности: (i) Как начинается перемещение для соразмерной системы с $\theta = 1$; начинается ли оно с появления пары ДС–анти-ДС (дислокационной петли) или с появления бегущего островка? (ii) Как происходит перемещение после появления зародыша? (iii) Как механизм перемещения зависит от концентрации атомов и структуры слоя? (iv) Если в системе с самого начала присутствует ДС, то является ли ее движение устойчивым и при какой скорости? (v) Появляются ли пространственно неоднородные установившиеся состояния “пробки движения” в течение перемещения? В следующем параграфе мы дадим некоторые ответы на эти вопросы.

11.5.1 Переход от захвата к скольжению

Браун с соавторами [842] рассмотрели двухмерный слой частиц с радиус векторами $\mathbf{u} = (u_x, u_y)$, расположенный на периодическом потенциале подложки (11.66) с треугольной симметрией. Были использованы периодические граничные условия в обоих пространственных направлениях x и y . Авторы рассмотрели случай парного экспоненциального отталкивания между атомами,

$$V_{\text{int}}(r) = V_0 \exp(-\gamma r), \quad (11.68)$$

с выбором $\gamma = a_s^{-1}$, и случай взаимодействия Леннарда-Джонса (ЛД)

$$V_{\text{int}}(r) = V_0 \left[\left(\frac{a_s}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{a_s}{r} \right)^6 \right], \quad (11.69)$$

где r – межатомное расстояние. Экспоненциальный случай является чисто отталкивающим с отсутствием минимума у потенциала. Эта ситуация соответствует, в частности, атомам химически адсорбированных на поверхности металла, когда, из-за разрушения трансляционной симметрии в направлении ортогональном к поверхности, атомы имеют ненулевые дипольные моменты, которые приводят к их взаимному отталкиванию [36]. Для взаимодействия ЛД имеется притяжение и отталкивание, с минимум у потенциала при расстоянии между атомами $r = a_s$. Когда атомы плотно упакованы и работает только одна отталкивающая ветвь потенциала взаимодействия, как, например, в случае пленки смазки между двумя подложками, оба потенциала будут качественно одинаковыми. Но когда слой имеют области растяжения, где межатомные расстояния превышают равновесное расстояние $r = a_s$, потенциал ЛД может приводить к фазовым переходам первого порядка.

Уравнения движения для векторов смещения N атомов $\mathbf{u}_i$ ($1 \leq i \leq N$) имеют вид

$$\ddot{v}_i + \eta \dot{v}_i + \frac{d}{dv_i} \left[\sum_{j(j \neq i)} V_{\text{int}}(|\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j|) + U_{\text{sub}}(\mathbf{u}_i) \right] = F^v + F_{\text{rand}}^v, \quad (11.70)$$

где $v = u_x$ или u_y , $F^v = F_x$ или F_y приложенная внешняя сила (в моделировании движущая сила действовала только в направлении x , то есть $F_x = F$, $F_y = 0$), а F_{rand}^v – случайная сила необходимая для равновесия системы при данной температуре T . Были использованы безразмерные системные единицы ($m_a = 1$, $a_s = 2\pi$ и $\varepsilon = 2$, так что $\omega_0 = 1$ и период колебаний частицы в потенциале подложки $\tau_s = 2\pi$).

Для того чтобы охарактеризовать систему полезно определить эффективную постоянную упругости $g_{\text{eff}} = a_s^2 V''(r_0)/2\pi^2 \varepsilon$, где r_0 среднее межатомное расстояние. Это число характеризует величину упругости слоя атомов относительно высоты потенциала подложки. Значение g_{eff} много меньше 1 означает относительно слабо связанный слой, с другой стороны значение много больше 1 означает жесткий атомный слой по сравнению с глубиной подложки. Оба случая большого и малого g_{eff} соответствуют физически уместным системам. Для монослоя адсорбированного на поверхности, наиболее типическим является предел низкого g_{eff} [36]. Слой смазки между двумя блоками материала соответствует пределу больших g_{eff} . Тот факт, что каждый из блоков материала имеет не свободный монослой означает, что слой расположенный сразу выше поверхности раздела имеет большую эффективную постоянную упругости. Хотя возмущения ограничены слоем блока на поверхности скольжения, остальные более высокие слои сохраняют разделение между первым слоем и нижнем блоком, уменьшая эффективную глубину потенциала подложки. Кроме того, другие слои имеют тенденцию захватывать структуру первого слоя, делая его более жестким чем один монослой.

Для случая плотно упакованного атомного слоя с $\theta = 1$, основное состояние слоя имеет треугольную структуру соразмерную с подложкой. Частотный спектр идеальной треугольной решетки описывается функциями $\omega_x^2(k) = \omega_g^2 [3 - 2 \cos(ak_x) - \cos(ak_x/2) \cos(a_y k_y)]$ и $\omega_y^2(k) = 3 \omega_g^2 [1 - \cos(ak_x/2) \cos(a_y k_y)]$, где $\omega_g = \sqrt{g_{\text{eff}}}$ и $a_y = a\sqrt{3}/2$, так что для поперечной волны двигающейся в направлении x (то есть при $k_y = 0$) групповая

скорость $v_T = \lim_{k_x \rightarrow 0} d\omega_y(k)/dk_x = \sqrt{3}a\omega_g/2\sqrt{2}$, в то время как групповая скорость продольной волны $v_L = \lim_{k_x \rightarrow 0} d\omega_x(k)/dk_x = \sqrt{3}v_T$.

Так как в ОС все атомы лежат в минимумах подложки, то слой строго закреплен. Для возбуждения движения сначала нужно создать топологический дефект (локализованный дефект подобный краудиону или дислокационной петле). Размер этого дефекта должен быть порядка $d \sim a_s \sqrt{g_{\text{eff}}}$, так что можно ожидать различные сценарии для малых и больших значений g_{eff} . Действительно, около некоторого порогового значения $g_{\text{eff}} = g_1$ на ранних стадиях перехода происходит замена одного характерного сценария другим.

Жесткий слой. В режиме $g_{\text{eff}} \gg g_1$ переход из закрепленного в бегущее состояние происходит через образование островковдвигающихся атомов в море повсюду стационарных частиц. Размердвигающегося островка растет быстро в направлении приложенной силы и значительно медленнее в перпендикулярном направлении. *Внутри островка атомы в основном сохраняют свою структуру* из-за жесткости атомного слоя. Следовательно, можно увидеть области чрезвычайно точной треугольной решетки окруженные петлями частичных дислокаций. В силу периодических граничных условий, островок в конечном счете соединяется сам с собой. Образуется лента, ориентированная параллельно движущей силе и ограниченная в направлении перпендикулярном к движущей силе, в которой частицы двигаются вдоль периодически продолженной системы. Мы назовем такое состояние *рекой*. Река затем расширяется перпендикулярно к направлению движения до тех пор пока все атомы не начнут двигаться.

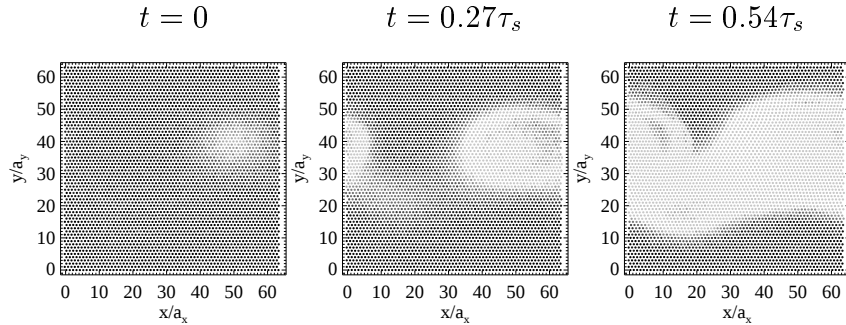


Рис. 11.17. Мгновенные снимки механизма перехода из закрепленного состояния в бегущее для ЛД взаимодействия с $g_{\text{eff}} = 0.9$, $\eta = 0.141$, $T = 0.05$, и $F = 0.9933$. Положения атомов обозначены маленькими окружностями. Серая шкала цвета окружностей показывает x компоненту скорости: черный цвет соответствует нулевой скорости, а наиболее светлый серый – скоростям выше некоторой скорости обреза [842].

Динамика этого сценария показана на серии снимков рисунка 11.17. Тот же самый сценарий выполняется для обоих типов взаимодействия. Однако, значение g_1 , выше которого выполняется описанный сценарий, является разным для ЛД и экспоненциального взаимодействия. При том же самом значении g_{eff} ЛД слой ведет себя более жестко чем слой в экспоненциальном случае. Было обнаружено, что $0.1 < g_1 < 1$ для ЛД случая и $g_1 \approx 1$ для экспоненциального случая.

Моделирование показало, что размер зародышевого островка увеличивается с возрастанием g_{eff} . При дальнейшем увеличении g_{eff} характерный размер островка при увеличении стремится к размеру системы. Для очень жесткого слоя частиц, когда $g_{\text{eff}} > g_2$, переход происходит за счет начала движения целой системы атомов. Значение g_2 естественно зависит как от размеров системы, так от деталей потенциалов $V_{\text{sub}}(x, y)$ и $V_{\text{int}}(r)$. В частности, g_2 возрастает с ростом N , так что при увеличении системы можно ожидать переходов со все большими и большими островками. Для системы с фиксированным размером и фиксированной температурой, ЛД взаимодействие снова дает большую жесткость чем экспоненциальное взаимодействие, имеющее меньшее значение g_2 .

Слабо связанный слой, экспоненциальное взаимодействие. Для слабого межатомного взаимодействия, когда $g_{\text{eff}} \ll g_1$, было обнаружено что переход из закрепленного в бегущее состояние происходит через образование лавиныдвигающихся частиц оставляющей позади разреженную область низкой плотности. *Атомы в области возмущения не находятся в регулярной структуре*, так что мы можем считать, что переход из закрепленного в бегущее состояние начинается с появлением “расплавленного” островка. Снимки системы для экспоненциального межатомного взаимодействия в три момента времени в течении перехода показаны на рис. 11.18 для случая с $g_{\text{eff}} = 0.1$. Тепловые флуктуации вызывают движение малого числа частиц вдоль направления приложенной силы. Эти флуктуации сохраняются достаточно долго для локального разрушения треугольного упорядочивания атомов, они позволяют атомам уходить из минимумов подложки. Двигающиеся атомы ускоренные приложенной силой, оставляют позади себя разреженную область. Размер области возмущения быстро растет в направлении

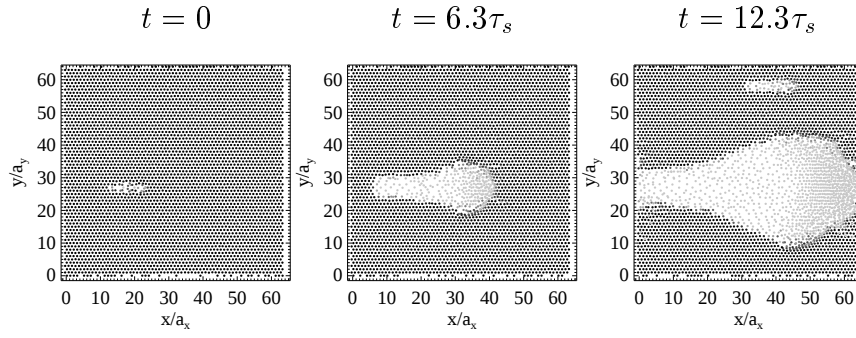


Рис. 11.18. Снимки перехода из закрепленного состояния в бегущее для системы с экспоненциальным взаимодействием с $g_{\text{eff}} = 0.1$, $\eta = 0.1$, $T = 0.01$, и $F = 0.94$ [842].

движущей силы, так какдвигающиеся атомы падают на стоящие перед ними неподвижные частицы. Тепловые флуктуации и не сбалансированное отталкивающее взаимодействие, возникающее вследствие ухода соседних атомов, позволяют неподвижным атомам прилегающим к области разрежения легко переходить в движение. На переднем крае возмущения создается область с повышенной плотностью, так как движущиеся частицы способны двигаться быстрее чем передний край. Подвижные частицы поэтому замедляются при приближении к переднему краю, создавая тем самым плотную область медленных частиц, почти так же как замедляется движение на дороге при приближении к помехе. Мы будем называть ситуацию такого типа эффектом *пробки*. Утолщение на переднем крае растет в обоих (параллельном и перпендикулярном) направлениях к движущей силе, до тех пор пока область движущихся атомов не соединяется сама с собой в силу периодических граничных условий. Образования утолщения ясно видно на двух последних снимках рисунка 11.18 (заметим, что в этой частном моделировании происходит также появления второго зародыша).

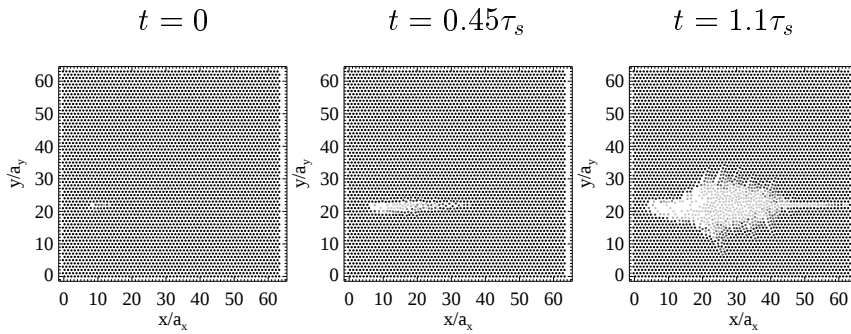


Рис. 11.19. Снимки механизма перехода из закрепленного в бегущее состояние для системы с ЛД взаимодействием с $g_{\text{eff}} = 0.023$, $\eta = 0.2$, $T = 0.0025$ и $F = 0.9901$ [842].

Слабо связанный слой, ЛД взаимодействие. Для системы с взаимодействием ЛД сценарий перехода слегка отличается. Снимки для ЛД взаимодействия с $g_{\text{eff}} = 0.023$ показаны на рис. 11.19. Снова, тепловые флуктуации позволяют малому числу частиц начать двигаться в x -направлении. Для случая показанного на рис. 11.19 это были 4 – 5 соседних частиц в той же самой плоскости $y = \text{Const}$. Область возмущения быстро расширяется в направлении приложенной силы как и в случае экспоненциального взаимодействия и позади области снова образуется область разрежения. В ЛД случае атомы в следе возбужденной области приходят в движение из-за притягивающего взаимодействия между частицами на расстояниях превышающем $r = a_s$. Эффект создания движущимися частицами пробкоподной области уплотнения для ЛД взаимодействия отличен от этого эффекта для экспоненциального взаимодействия. В последнем случае образуется очень плотная область, которая выпирает из области возбуждения. Как видно из рисунка 11.19, для ЛД взаимодействия увеличение плотности заставляет область возмущения расти не только в направлении движущей силы, но также в основном вдоль других двух плоскостей скольжения треугольной решетки. На переднем крае область возмущения не становится такой большой как для экспоненциального взаимодействия, а вместо создания выпирания область

возмущения развивает “зубцы” на углах $\pm\pi/3$ относительно направления движущей силы. в более позднее время область возмущения из-за периодических условий соединяется само с собой.

Один лишний атом. Для описанного выше соразмерного случая, первым событием в дальнейшем переходе является создание возмущенной области из-за тепловых колебаний. Скорость таких процессов контролируется множителем Больцмана $\exp(-\varepsilon_{\text{act}}/T)$, где энергия активации ε_{act} определяется движущей силой, например $\varepsilon_{\text{act}} \propto (1 - F)^{1/2}$ в случае $g_{\text{eff}} \ll 1$. В моделировании Брауна с соавторами [842] (2001) были использованы низкие температуры с целью снижения “шума” в снимках и, поэтому, были использованы силы очень близкие к максимальному значению $F = 1$. Чтобы проверить, отличается ли сценарий при малой силе, авторы также провели моделирование с одним лишним атомом в соразмерной структуре. В одномерной модели ФК такая ситуация соответствует одному “геометрическому” кинку, который легко движется по решетке. В изотропной двухмерной модели конфигурация с одним вставленным атомом, окруженным “деформационным облаком” (из-за сдвига соседних атомов вокруг вставленного атома), создает локализованную конфигурацию называемую краудионом. Подобно одномерной модели, краудион движется намного легче чем атомы фоновой соразмерной структуры. При малой F краудион совершает направленные случайные скачки в x направлении, но иногда он может также перескочить в ближайший соседний x -канал и вытолкнуть атомы из их идеальных положений. С увеличением силы, в некоторый момент образуется дополнительная краудион–анти-краудионовая пара и затем начинает расти лавина. Последующий сценарий был таким же как в описанном выше полностью соразмерном случае. Однако, теперь критическое значение силы F_c при котором начинается образование лавины намного меньше чем в соразмерном случае.

Более поздние времена. Во всех случаях, область возмущения соединяется сама с собой из-за периодических граничных условий. Для относительно малой квадратной системы (например, для $N \leq 64 \times 64$) движущийся домен не имел большой возможности для роста в перпендикулярном к движущей силе направлении, до соединения ее с собой и формирования *реки* движущихся частиц. В середине реки атомы двигаются почти с максимальной скоростью F_c/η и сохраняют упорядоченную треугольную структуру. Однако, граница между движущимся и закрепленными областями слоя, которая состоит примерно из десяти атомных каналов, является полностью неупорядоченной. Было найдено, что ширина реки растет примерно линейно с временем, со скоростью, которая уменьшается с увеличением трения или температуры, пока вся системы не перейдет в бегущее состояние. Этот сценарий является достаточно общим, так как даже в бесконечной системе, соседние области возмущения возникающие из тепловых флуктуаций, будут соединяться при достижении некоторого критического размера, как это обычно происходит в перколяционных системах.

Для больших квадратных систем Браун и др. [842] наблюдали, что движущаяся область в действительности существенно растет в обоих направлениях, перпендикулярном и параллельном движущей силе. При $T = 0$ передний край движущегося домена имеет приближенно полукруглую форму. Его диаметр растет со скоростью v , а край двигается со скоростью s . Было найдено, что обе скорости v и s примерно равны продольной групповой скорости слоя v_L . Так как двигающаяся область далее переходит в область поступательного движения, то ее подвижность должна расти как t^2 .

11.5.2 “Плавкий предохранитель” на атомном уровне

Нелинейная динамика всех описанных выше моделей имеет одно общее свойство: средняя скорость перемещения $\langle v \rangle$ системы является *монотонно возрастающей* функцией приложенной силы F . Ниже мы описываем *немонотонный* сценарий, когда система имеет ненулевую проводимость ($\langle v \rangle \neq 0$) при малых силах и становится закрытой ($\langle v \rangle = 0$) при больших силах. Такой сценарий *предохранителя* будет описан для двух простых механических моделей взаимодействующих атомов имеющих *более чем одну пространственную размерность*:

(а) Зигзагообразная модель ФК, то есть цепочка атомов единичной массы расположенная на двухмерном внешнем синусоидальном потенциале с амплитудой $\varepsilon_s = 2$ и периодом $a_s = 2\pi$ в направлении x (вдоль цепи) и на параболическом потенциале в поперечном направлении y . Полный вид потенциала $V_{\text{sub}}(x, y) = (1 - \cos x) + (1/2)\omega_y^2 y^2$;

(б) Изотропная 2D модель ФК, то есть массив атомов адсорбированный на периодическом двухмерном потенциале с квадратной симметрией $V_{\text{sub}}(x, y) = 2 - (\cos x + \cos y)$.

Для модели (а) изолированный атом вблизи минимума потенциала имеет частоту x -колебания $\omega_x = 1$, в то время как частота поперечных y -колебаний задается значением ω_y . Для модели (б) колебания вблизи минимума являются изотропными, частота $\omega_x = \omega_y = 1$. Если сила приложена вдоль x , то изолированный атом начинает скользить при критическом значении силы $F_{\text{crit}} \equiv \pi\varepsilon_s/a_s = 1$. В обоих моделях мы возьмем экспоненциальное взаимодействие между атомами $V_{\text{int}}(r) = V_0 e^{-\beta r}$ (при моделировании была использована величина $\beta = 1/\pi$), где амплитуда V_0 может быть для удобства представлена как $V_0 = g(\pi e)^2$. Движение атомов моделируется уравнениями Ланжевена с вязким трением η и внешней постоянной силой F приложенной в x направлении.

Давайте рассмотрим ситуацию когда каждая потенциальная яма занята одним атомом (тривиальная соразмерная структура) и имеется несколько добавленных лишних атомов, которые в основном состоянии образуют локализованные

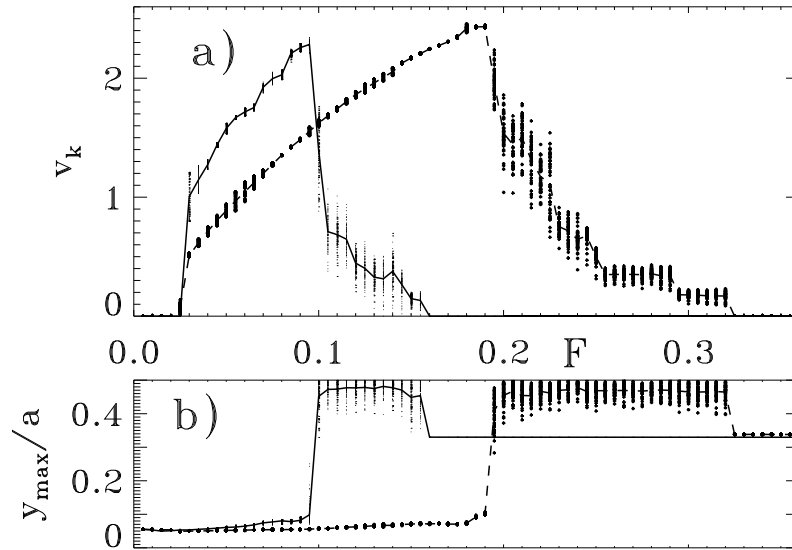


Рис. 11.20. Сценарий работы предохранителя для изотропной 2D модели ФК. (а) Зависимость скорости v_k от силы F . Кривые показывают средние значения, в то время как символы представляют данные из моделирования (использовалось 100 точек в течении времени 200π для каждого значения F). Малые точки и сплошные кривые получены при $\eta = 0.1$, толстые точки и пунктирные кривые – при $\eta = 0.2$. В части (b) тоже самое как в (а) только для максимума поперечного смещения атомов $y_{\max}$, определенного как максимум отклонения координаты y атома от ближайшей линии $y = 2\pi n$, где n целое число [843].

сжатия (*кинки*). Например, в модели (а), мы поместив N атомов на M ям, будем иметь в цепи $N_k = N - M$ кинков с безразмерной концентрацией $\theta = N/M$. В модели (b) это нужно повторить для каждого ряда $y = 2\pi n$, где n целое число.

Кинки являются эффективными переносчиками массы, так как они начинают скользить при силе намного меньшей чем $F_{\text{crit}} = 1$. Специфическое свойство обоих введенных выше двухмерных моделей, отсутствующее у одномерной модели ФК, состоит в том что лишняя пространственная размерность допускает поперечную “ y -ориентацию” кинков. Приложенная вдоль x возрастающая сила, может поворачивать скользящие кинки поперек, так что они останавливаются, и система переходит в закрепленное состояние. Основным результатом, зависимость скорости кинка [определенной как $v_k = \langle v \rangle N/N_k$] от внешней силы F при различных значениях трения η и концентрации θ , показан на рис. 11.20(a) для модели (а) в качестве примера. Из рисунка ясно видно “предохранительное” поведение: начальный линейный рост скорости v_k с ростом F насыщается как только скорость кинков достигает некоторого критического значения, затем скорость v_k резко идет к нулю. Рисунок 11.20(b) показывает что этот процесс сопровождается увеличением поперечных y -смещений атомов.

Детальное исследование механизма работы молекулярного предохранителя можно найти в работе Брауна с соавторами [843]. Механизм закрепления связан со случайными поперечными колебаниями атомов в ядрах кинков. Когда сила растет, амплитуда этих колебаний резко увеличивается после того как кинки достигают определенной критической скорости, и наконец мобильное состояние трансформируется в неподвижное с кинками ориентированными *ортогонально* приложенной силе.

В общем, для того чтобы имел место такой особенный сценарий, напоминающий действие “плавого предохранителя” на атомном уровне, система должна иметь следующие компоненты: (i) *подвижное* основное состояние, (ii) замкнутое метастабильное состояние, которое является *неподвижным* при некоторых значениях силы, и (iii) с увеличением приложенной силы F система должна переходить из подвижного состояния в неподвижное, тем самым переходя в закрепленное состояние.

Заключение

В области нелинейной динамики и теории солитонов было издано много книг которые включают анализ нелинейных моделей низкоразмерной физики твердого тела и их различные приложения. Большинство этих книг обсуждают различные физические явления, где оказывается важным учет нелинейных возбудений, а также описывают некоторые технические методы для решения нелинейных уравнений в частных производных. Название этой книги выглядит немного узким, и, действительно, оно более часто используется в узком контексте классической модели используемой в динамике дислокаций. Спонтанная, непосредственная реакция небрежного читателя к такому названию может быть суммирована в общем вопросе: "*Зачем изучать эту конкретную модель?*"

Нашей главной целью в отборе тем рассмотренных в этой книге было продемонстрировать единую общность многих физических концепций и методов. В отличие от многих других авторов, мы не ограничивали себя специфическими приложениями или специфическими областями физики, но вместо этого попытались представить панорамный взгляд на фундаментальные концепции низкоразмерной нелинейной физики. И действительно, тема *Модель Френкеля-Конторовой* обеспечивает единый каркас для реализации наших целей, очевидным образом связывая разные области физики, где нелинейные модели используются для описания многих физических явлений. Работая над различными частями этой книги в течении десяти и даже более лет, мы пытались следить за быстро растущей литературой в этой и близких областях. К нашему большому удивлению, мы находили все больше и больше примеров новых физических систем где могут быть эффективно применены фундаментальные понятия и результаты полученные для модели ФК при анализе ее нелинейных возбудений, таких как кинки и бризеры.

Было бы уместно отразить в настоящей книге некоторые из более свежих идей, чтобы расширить панорамное представление физически важных моделей, приведенных в главе 2. Этот диапазон приложений простирается от физики вихрей в высокотемпературных сверхпроводниках до микроскопических моторов на атомной шкале, и число уместных примеров кажется действительно бесконечным. Ниже, мы упоминаем только несколько из новых разработок, которые приносят новые идеи и новые обобщения модели, не упомянутые раньше в этой книге.

Вихревая материя. В последние годы, проявляется глубокий интерес к исследованию статических и динамических свойств ансамблей вихрей (так называемая *вихревая материя*) на пространственном профиле выпуклого потенциала возникающего, например, из-за дефектов подложки. Поведение решетки вихрей было исследовано как экспериментально, так и теоретически в присутствии большого разнообразия потенциальных полей от чисто случайных до строго периодических. Некоторые из этих исследований показали существование статических каналов повышенной подвижности вихрей, когда внешнее поле (или ток) превышает критическое значение. В дополнении было показано, что этот критический ток пропорционален силе взаимодействия между вихрями внутри канала и вихрями на краях канала, как определяется сдвиговым модулем решетки вихрей. Точное теоретическое описание этого явления и его зависимости от ширины канала все еще отсутствует. Беселинг с соавторами [844] изучили свойства статических каналов повышенной подвижности применяя модель ФК и они показали, что несогласованность между шириной канала и постоянными решетки приводит к (точечным) дефектам в канале, приводящим к убыванию сдвигового напряжения. Это может иметь важные следствия для свойств вихревой материи в закрепляющем потенциале с большими пространственными вариациями в напряжении.

Управляемые решетки вихрей взаимодействующие либо со случайным или периодическим беспорядком привлекают все больший интерес из-за богатого разнообразия неравновесных динамических фаз которые возникают в этих системах. Эти фазы включают упругий и пластический поток вихрей, который может быть отнесен к упорядочиванию решетки вихрей и к транспортным свойствам. Структура дефектов взаимодействующих с решеткой вихрей привлекает внимание многих исследователей в связи с недавними экспериментами с системами дырок и магнитных точек в которых наблюдается эффекты соизмеримости и усиленного пининга. Эти системы

являются прекрасной реализацией упругой решетки взаимодействующей с периодическим потенциалом подложки. Похожие системы возникают при изучении волн зарядовой плотности, цепочек джозефсоновских контактов и ФК моделей трения. Интересной проблемой связанной с закреплением периодических цепочек являются свойства симметрии и их влияние на транспортные характеристики, когда вихревая решетка ускоряется силой приложенной под разными углами [845].

Во многих задачах связанных с закреплением решеток вихрей эффективный потенциал подложки является аperiodическим. Всюду в книге мы главным образом рассматривали случай синусоидального потенциала подложки и, хотя мы часто обсуждали возможное изменение результатов при несинусоидальной форме потенциала, всегда полагали что подложка строго периодична. Интересное обобщение модели возникает если потенциал является *квази-периодической* функцией. Эта задача была, в частности, изучена ван Эрпом с соавторами [846] а также Ваноси с соавторами [847]. Модель такого типа может описывать, например, поверхность квазикристалла и также позволяет приблизиться к решению более сложной задачи случайного потенциала подложки. Для цепи с фиксированной плотностью, эта модель также демонстрирует переход Обри из закрепленного в скользящее состояние при увеличении постоянной упругости g . В такой модели, в противоположность классической модели ФК, сила ПН будет ненулевой при любой силе взаимодействия.

Новые топологические дефекты. Еще одно интересное приложение концепций связанных с моделью ФК связано с ее возможностью моделировать сложные топологические структуры или дефекты в по существу двух- (и даже трех-) мерных системах. Магнитные системы являются наиболее часто используемым примером. Так Ковалев [75] предложил обобщение модели ФК для описания антиферромагнитно (АФМ) упорядоченного упругого кристалла. Он показал что модель ФК может описать сложные топологические дефекты в двухмерных АФМ кристаллах в форме связанного состояния дислокации с магнитным моментом. Эквивалентность между некоторыми простыми магнитными моделями и моделью ФК была сформулирована Тралори [848], включая модели магнитных суперрешеток Fe/Cr(211).

Недавно, Коршунов [849] представил аргумент для кинк-антикинковых переходов в полностью фрустрированной XY модели (на квадратной или треугольной решетке). Эти переходы вызывает фазовый переход, связанный с разрывом вихревых пар. Этот переход происходит при более низкой температуре чем другие фазовые переходы, связанные с разрастанием доменных стенок Изингового типа. Эти результаты могут быть применены для описания цепочек сверхпроводящих контактов и проводящих сетей в перпендикулярном магнитном поле, так же как и для плоских антиферромагнетиков с треугольной решеткой.

Черников и Прядко [850] описали режим сильного связывания между носителями зарядов и поперечной динамикой изолированных проводящих полос, наподобие того что может быть найдено в купратных сверхпроводниках. Проводник моделируется как частично легированная доменная стенка в АФМ, где легированные дырки могут потерять свой спин и создать новый топологический объект – *холоны*, который движется вдоль проводника. Одной из особенностей отличающих холоны на доменной стенке от холонов в одномерном газе электронов является их поперечная степень свободы – магнитный холоны всегда связан с поперечным кинком (или антикинком) доменной стенки. Это приводит к сильной связи между легированными зарядами и поперечными флуктуациями в проводнике.

Будучи вдохновленным экспериментальным наблюдением купратных проводящих каналов наклонных к кристаллической оси, Буш с соавторами [851] предложили новый тип проводящей фазы в сильно легированном режиме. В этом случае топологическими возбуждениями являются *кинки с дробным зарядом*, который приводит к флуктуациям проводящих каналов и их наклонов. Экспериментальное измерение зависимости угла наклона от степени легирования позволяет определить фундаментальный квант заряда в проводнике. Согласно этим авторам, заряды должны быть упорядочены так, что возможно наблюдение отражения от суперрешетки кинков в дифракционных экспериментах. С другой стороны, заряд переносится кинками, так что в случае когда длина экранирования становится порядка или больше расстояния между кинками, кинки будут стремиться сохранить максимальные расстояния формируя "вигнеровский кристалл".

Двигатели на атомном уровне. Модель ФК часто используется для объяснения основных принципов работы двигателей атомного уровня, таких как биологические моторы, системы с ратчетом и молекулярные роторы. Главной задачей для устройств этого типа является объяснение как на таких малых расстояниях происходит преобразование энергии в направленное движение. В частности, Порто с соавторами [852] предложили новый подход для построения микроскопических машин на атомном уровне совершающих поступательное или вращательное движение и могущих выполнять полезные функции, такие как перевозка груза. Характерная особенность этих машин – возможность управлять динамически направлением движения. Подход основан на трансформации входящей энергии в направленное движение через динамическую связь между внутренней длиной движущегося объекта и поддерживающего носителем. Основными преимуществами этого нового подхода являются то, что (а) одна и та же концепция применяется для обоих типов трансляционного и ротационного движений, (b) направление движения определяется динамически и не требует пространственной асимметрии движущегося объекта или поддерживающего носителя, (с) результирующая скорость может изменяться в широком интервале, независимо от направления, и (d) мощность машины достаточна для транспортировки груза.

Что может в заключении получить каждый из изучения этой частной модели? Пока результатом исследования является развитие универсальных инструментов для изучения нелинейных систем, мы убеждены что читатель может овладеть основными принципами в междисциплинарных концепциях и методах физики твердого тела и нелинейной динамики. Эта книга объединяет многие важные темы, такие как нелинейная динамика дискретных систем, динамику солитонов и их взаимодействие, соразмерные и несоизмеримые системы. Мы уверены что список возможных приложений этой модели будет устойчиво расти и в ближайшем будущем. Причина этого проста: Реальные физические системы часто очень сложны и всегда важно разработать фундаментальные концепции физики, основанные на более простых моделях. *В конце концов, это именно то чем занимается область науки именуемая физикой!*

Исторические замечания

Летом 1948 года я попросил одного из моих академических преподавателей Ульриха Делингера (Ulrich Dehlinger), профессора теоретической физики Технической Высшей Школы Штутгарта (теперь университет Штутгарта), предложить мне направление исследования для дипломной работы (*Diplom-Arbeit*) по физике. Эта должна была быть теоретическая тема, так как прошло всего три года после окончания второй мировой войны, так как в почти полностью разрушенном университете помещений и оборудования для экспериментальных лабораторий было очень мало. Даже нахождение многообещающей темы было трудной задачей, так как в течение войны Германия была почти полностью отрезана от международной научной литературы, а новые контакты еще не были установлены.

Профессор Делингер предложил мне посмотреть работу Френкеля и Конторовой [6], на которую он и Кочендорфер (Kochendörfer) несколько лет ранее написали комментарий [853]. Обе эти работы были основаны на модели которую Делингер построил как часть его диссертации (*Habilitationsschrift*), представленной в Техническую Высшую Школу Штутгарта 14 мая 1928 года, см. рис. 13.1. Делингер понял, что модель допускает нетривиальные механически устойчивые решения, для которых он получил приближенное аналитическое выражение. На современном языке эти решения '*Verhakungen*' назвали бы парами кинков противоположного знака или проще *кинковыми парами*. Если модель Прандта–Делингера рассматривать как редукцию двумерной модели, как отметил Делингер, то его '*Verhakungen*' соответствует дислокационным диполям, которые считались ответственными за восстановление и/или перекристаллизацию пластически деформированных металлов. Детали 'перевода' одной модели в другую можно посмотреть в книге [854].

Людвиг Прандт (Ludwig Prandtl) построил по существу ту же модель еще в 1912/13 годах, но не публиковал ее до 1928 года [1]. Однако, подход Прандта и Делингера к решению основных уравнений был совершенно другим. Делингер признал приоритет Прандта в создании модели, но подчеркнул, что его работа была сделана независимо.

Мое внимание сразу захватило теперь хорошо известное аналитическое решение Френкель–Конторовой для равномерно движущегося одиночного кинка, так как было очевидно что полная модель не могла иметь никаких равномерно движущихся решений. Однако, физический смысл допущений, которые должны были сделать Френкель и Конторова для получения своего решения был не очень ясен. Особенно загадочным было введение отрицательной атомной массы. После нескольких бесплодных попыток прояснить ситуацию и поиска *точных* решений, я понял, что модель учитывала кристаллическую структуру двумя различными путями и что они могут быть использованы раздельно, в зависимости от вопроса на который нужно ответить.

(i) Существование атомов учитывается *дискретностью* модели. Прямым следствием этого является то, что основное уравнение является системой *разностно-дифференциальных* уравнений.

(ii) Сила, которую оказывают друг на друга два смежных ряда атомов или, в более общем случае, две соседние плоскости решетки, является *периодической функцией* их относительных смещений. В модели она представлена синусоидальной функцией, период которой *a* предполагается равным межатомному расстоянию кристаллической структуры.

В моей дипломной работе (*Diplomarbeit*) я показал как систематическим путем получить *континуальную модель*, обладающую свойством (ii) связанном с параметром решетки *a*, являющимся одним из важнейших характеристик кристаллической решетки. Я вывел нелинейное дифференциальное уравнение в частных производных

$$\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \sin u, \quad (13.1)$$

где *z* – нормализованная пространственная координата, *t* – нормализованное время, а *u* = *u*(*x*, *t*) – нормализованное относительное смещение двух смежных колонок атомов. Уравнение (13.1) обладает Лоренцовой инвариантностью, и поэтому я смог получить равномерно движущиеся решение из стационарного решения в терминах эллиптических функций Якоби; решение Френкеля–Конторовой оказывалось только частным случаем.

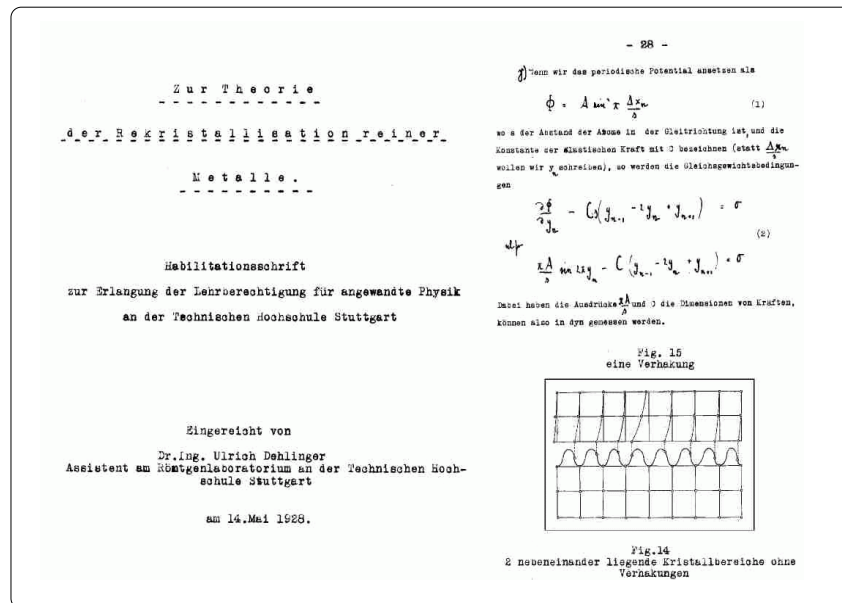


Рис. 13.1. Две страницы диссертации (*Habilitationsschrift*) Делингера. Решения ‘*Verhakungen*’ являются парами кинков противоположного знака или, проще говоря, *кинковыми парами*.

Для моей докторской диссертации, я выбрал две основные темы. Уравнение (13.1) было намного проще чем исходная система разностно-дифференциальных уравнений. Это обстоятельство толкнуло меня к попытке расширить двух-параметрическое семейство решений, которые я получил в своей дипломной работе. Как первый шаг, я развил подход с использованием теории возмущений и использовал его, среди других тем, для учета влияния внешних сил и решения задачи Коши для полученных ранее решений. Этот подход может быть рассмотрен как предвестник точного решения, которое было получено после того как были открыты солитонные свойства уравнения (13.1). Другой темой, которая остается важной и до сих пор, было изменение частотного спектра кристалла вызванное присутствием кинков на дислокациях. Как было показано выше в главах 6 и 7 книги Брауна и Кившара, это играет ключевую роль в статической термодинамике кинков.

Вторая важная тема возникает из противоречия между моделями Френкеля–Конторовой и Делингера–Когендорфера в вопросе является ли решение Френкеля–Конторовой связанным с концепцией дислокации развитой Тэйлором [855], Полани [856] и Орваном [857]. Делингер и Когендорфер [853] придавали особое значение этой взаимосвязи, которой явно пренебрегали Френкель и Конторова [6]. Между тем, по предложению Орвана, Пайерлс [142] количественно рассмотрел модель которая объединяет пункт (ii) с континуальным подходом Тейлора основанном на линеаризованной теории упругости изотропной среды [855]. Методом проб и ошибок он нашел решение нелинейного интегродифференциального уравнения описывающего уединенную дислокацию. С тех пор, с физической точки зрения, модель Орвана–Пайерлса описывает ту же самую ситуацию что и уравнение (13.1) в независимом от времени случае, и так как не было известно (и до сих пор нет) никакой систематической процедуры решения интегро-дифференциального уравнения Пайерлса, я развивал эвристический подход для получения решений уравнения Пайерлса соответствующих решениям дипломной работы (*Diplomarbeit*) [858].

Простота и элегантность полученных результатов позволяла мне ожидать, что несмотря на нелинейность, уравнение (13.1) может иметь другие решения, отличные от тех что я уже нашел. В физике преподаваемой в то время, нелинейные задачи почти не играли никакой роли, и если они возникали, то их обычно рассматривали при помощи теории возмущения и линеаризации. Я помнил, что в дифференциальной геометрии поверхностей ситуация была другой, там все задачи были нелинейными за исключением тривиальных, которые имели дело с плоскостями. Где-то в середине 1950 года, когда я просматривал единственную книгу Блашке по дифференциальной геометрии на моей книжной полке [859], я нашел случайное замечание, что если на поверхностях с кривизной Гаусса $K = -1$ (так называемые псевдосферические поверхности) асимптотические линии $p = \text{const}$, $q = \text{const}$ используются как параметрические линии, то угол ω между двумя наборами параметров должен удовлетворять уравнению

$$\frac{\partial^2 \omega}{\partial p \partial q} = \sin \omega. \quad (13.2)$$

Конечно, я сразу понял, что уравнение (13.2) есть ни что другое как уравнение (13.1), но записанное в координатах светового конуса. На языке дифференциальной геометрии ‘физические координаты’

$$u = p + q, \quad v = p - q \quad (13.3)$$

являются линиями кривизны поверхности. Асимптотические линии $p = \text{const}$, $q = \text{const}$ являются *характеристическими линиями* уравнения (13.1).

Книга Блашке ничего не говорила о точных решениях уравнения (13.2). Но так как поверхности постоянной кривизны являются простейшими нетривиальными объектами дифференциальной геометрии, то было вероятно что детальные результаты были уже получены. Доступ к ним я нашел в учебниках по дифференциальной геометрии Бианки [860, 861] и Айзенхарта [862]. Оказалось, что решающий шаг был сделан Бианки в возрасте 23 лет в его диссертации (*tesi di abilitazione*) в 1879 году [863]. Из одного решения уравнения (13.2) Бианки при помощи нелинейного преобразования (*trasformazione complementare*) получил другое. Замечательно, что Бианки смог получить этот крупный результат только из геометрических рассуждений. Аналитическая формулировка '*trasformazione complementare*' была дана только много позже и оказалась специальным случаем преобразования Бэклунда для уравнения (13.2). Еще более важной была теорема '*teorema di permutabilità*' Бианки [864], так как она позволяет без квадратур получить третье решение уравнения (13.2) когда уже есть два решения.

Моя попытка проследить первое появление в литературе уравнения (13.2) привела меня к убежденности, что Эннепер [8] был первым рассмотревшим уравнение (13.2). Поэтому для уравнений (13.1) и (13.2) я ввел термин: уравнение Эннепера [13]. В недавнем очень полном исследовании Хиерхоф [865, 866] показал, что Бур [867] в своих исследованиях поверхностей получил уравнение (13.1) еще в 1862 году, хотя и не в контексте псевдосферических поверхностей. Таким образом, исторически правильным именем для уравнений (13.1) и (13.2) должно быть *уравнение Бура-Эннепера*. К концу лета 1950 года стало ясно что я набрел на золотую жилу, но в силу сомнительных экономических и личных обстоятельств тех дней, разрабатывать ее до представления моей диссертации было невозможно. К счастью, я нашел в Гансе Донте (Hans Donth) очень способного студента, который поднял эту тему в дипломной работе. Мы поняли, что в физических терминах означает теорема дополнения (*theorema di permutabilità*) Бианки. Для уравнения (13.1) и (13.2) эта теорема для $\tan(u/4)$ играет такую же роль как принцип суперпозиции в линейных уравнениях. Именно это свойство суперпозиции характеризует *солитонные решения дифференциальных уравнений в частных производных*.

Первым новым обнаруженным нами решением было бризерное решение полученное из суперпозиции двух кинков противоположных знаков движущихся с равной скоростью в противоположных направлениях. Колебательный и локализованный характер бризера поднял вопрос о соответствующей терминологии. Делингер и Кочендорфер [853] использовали выражение *Eigenbewegungen* (характеристические движения) для одиночного кинкового решения уравнения (13.1). Они не только распознали некоторую аналогию с *Eigenschwingungen* (характерными колебаниями) кристаллической решетки (фиксированная энергия, соответствующая собственным значениям колебаниям), но также подозревали существование мод промежуточных между кинковыми решениями и обычными малоамплитудными колебаниями. После того как мы обнаружили эти 'пропущенные звенья' и, более того, показали что эти моды оказываются способными к суперпозиции в рассмотренном выше смысле, я чувствовал что имя *Eigenbewegungen*, указывающее большую общность чем *Eigenschwingungen*, было очень соответствующим. Для того чтобы сделать различие между решениями типа кинка и решениями типа бризера, я назвал первый класс *translatorische Eigenbewegungen*, а второй – *oszillatorische Eigenbewegungen*. Полвека спустя я все еще думаю что эти имена (с их английскими вариантами) были бы лучше чем все включающее выражение 'soliton', которое действительно используется для такой широкой области объектов, что оно каждый раз должно уточняться.

Мы испытали большое разочарование когда представили наши результаты научной публике, и когда попробовали пробудить интерес у математиков и физиков работающих в области теории дислокаций. Типичная реакция состояла в том, что мы рассмотрели очень специальную ситуацию не имеющую никакого общего интереса и которая недостойна дальнейшего исследования. Единственную поддержку мы получили от Эллиота Монтрола (Elliot Montroll). Будучи типичным 'решателем задач' с очень широкими интересами, он, если бы жил достаточно долго, конечно получил бы удовольствие от растущего влияния 'солитонной теории' на многие области науки. Вследствии этой разочаровающей реакции научного общества мы остановили публикацию наших математических результатов (некоторые из них до сих пор так и не были опубликованы) и вернулись к изучению применений. К счастью, это переключение тоже оказалось очень плодотворным направлением исследований.

В 1952 году я был приглашен написать две статьи в то время задуманную многотомную *Энциклопедию физики* Шпрингера, одну – о дефектах решетки [868], а другую – о пластичности кристаллов [869]. Написание первой статьи в 1953/54 годах предоставило возможность не только просуммировать наши результаты и связать их с работой других авторов, но также предложить возможные связи с экспериментальными наблюдениями. Самые важные предположения относились, с одной стороны, к резкому увеличению критического касательного напряжения металлов с кубической решеткой при низких температурах, таких как молибден и валентные кристаллы, полупроводники с алмазной кристаллической структурой и, с другой стороны, предсказание эффекта механической релаксации связанного с термически активированным и вынужденным образованием кинковых пар. Первое предположение было полностью подтверждено экспериментальными работами 1960-тых и 1970-тых годов. Относительно второго предположения, незадолго до того как рукопись пошла в печать, мое внимание привлекло исследование Бордони (Bordoni) низкотемпературной механической релаксации в различных пластически

деформированных гранцентрированных кубических металлах [870]. Наблюдения (по ограниченному общему признанию) казались соответствующими теоретическим предсказаниям. Так что я включил интерпретацию релаксации Бордони в терминах образования кинковых пар в свою статью для энциклопедии 1955 года [868].

Кинковая интерпретация релаксации Бордони (и подобных явлений релаксации, которые были обнаружены впоследствии) стала отправной точкой очень важного направления. Мы поняли, что в отличие от прямых дислокаций, кинки на дислокациях являются очень удобными объектами статистической механики, особенно при исследовании скорости процессов использующих дислокации. С важными вкладами Донта (H. Donth), Пфафа (F. Pfaff), Шиллера (P. Schiller) и Стензеля (G. Stenzel), основная теория была построена в течение следующего десятилетия (см. книгу [871], которая содержит также описание попыток дальнейшего развития идей Делингера о построении дискретной модели).

Уравнение (13.1) не всегда является лучшей отправной точкой, если учесть что на движение дислокации оказывает существенное влияние приложенное напряжение. Примером этого является трактовка свободной линейной энергии Гиббса дислокации в конфигурации седловой точки образования кинковой пары. Следуя Эшелби [872], для задачи этого типа мы можем получить физически корректные ответы, если в уравнении (13.1) мы заменим $\sin u$ на $(1/2)du^2(1-u)^2/du = u(1-u)(1-2u)$ и добавим постоянный член описывающий внешнее напряжение. Таким путем было построено полное аналитическое описание скорости образования кинковых пар, обусловленной напряжением и температурой, в предположении, что здесь применимо континуальное приближение [873, 874].

Очень плодотворное взаимодействие между экспериментами и теорией продолжались до сих пор. В настоящее время, оно составляет основной источник информации о Пайерлсовских барьерах дислокаций [875, 876].

Штутгарт, ноябрь 2002 гда.

Alfred Seeger

Список литературы

1. L. Prandtl: Z. angew. Math. Mech. **8**, 85 (1928)
2. U. Dehlinger: Ann. Phys. (Leipzig) **2**, 749 (1929)
3. Ya. Frenkel, T. Kontorova: Phys. Z. Sowietunion **13**, 1 (1938)
4. T.A. Kontorova, Ya.I. Frenkel: Zh. Eksp. Teor. Fiz. **8**, 89 (1938)
5. T.A. Kontorova, Ya.I. Frenkel: Zh. Eksp. Teor. Fiz. **8**, 1340 (1938)
6. Ya. Frenkel, T. Kontorova: J. Phys. Acad. Sci. USSR **1**, 137 (1939)
7. Ph. Rosenau: Phys. Lett. A **118**, 222 (1986)
8. A. Enneper: Nachr. Königl. Gesellsch. d. Wiss. Göttingen (1870), pp. 493-511
9. A.V. Bäcklund: *Om ytor med konstant negative krökning*, Lunds Universitets Ars-skrift XIX, **IV**, 1 (1882)
10. A. Kochendörfer, A. Seeger: Z. Physik **127**, 533 (1950)
11. A. Seeger, A. Kochendörfer: Z. Physik **130**, 321 (1951)
12. A. Seeger, H. Donth, and A. Kochendörfer: Z. Physik **134**, 173 (1953)
13. A. Seeger, In: *Continuum Models of Discrete Systems*, ed by E. Kröner, K.H. Anthony (University of Waterloo, Waterloo, Ontario 1980) p. 253
14. R. Döttling, J. Esslinger, W. Lay, A. Seeger, In: *Nonlinear Coherent Structures*, Lecture Notes in Physics, vol. 353, ed by M. Barthes, J. Léon (Springer-Verlag Berlin 1990) p. 193
15. N.J. Zabusky, M.D. Kruskal: Phys. Rev. Lett. **15**, 240 (1965)
16. C.S. Gardner, J.M. Greene, M.D. Kruskal, R.M. Miura: Phys. Rev. Lett. **19**, 1095 (1967)
17. J.K. Perring, T.H.R. Skyrme: Nucl. Phys. **31**, 550 (1962)
18. B.D. Josephson: Adv. Phys. **14**, 419 (1965)
19. A.C. Scott: Amer. J. Phys. **37**, 52 (1969)
20. M.J. Ablowitz, D. Kaup, A.C. Newell, H. Segur: Phys. Rev. Lett. **30**, 1262 (1973)
21. V.E. Zakharov, S.V. Manakov, S.P. Novikov, L.P. Pitaevsky: *Theory of Solitons* (Moscow Nauka 1980) [English Translation by Consultants Bureau, New York 1984]
22. Y. Hsu: Phys. Rev. D **22**, 1394 (1980)
23. J. Zadrodziński, M. Jaworski: Z. Phys. B **49**, 75 (1982)
24. M. Jaworski: Phys. Lett. A **125**, 115 (1987)
25. J. Rubinstein: J. Math. Phys. **11**, 258 (1970)
26. A.L. Martinez: Phys. Lett. A **114**, 285 (1986)
27. Yu.S. Kivshar, B.A. Malomed, Rev. Mod. Phys. **61**, 763 (1989)
28. S. Nakajima, T. Yanashita, Y. Onodera: Phys. Rev. B **45**, 3141 (1974)
29. M. Remoissenet: *Waves Called Solitons* (Springer Berlin Heidelberg New York 1999), Chap. 6
30. S. Dusuel, P. Michaux, M. Remoissenet: Phys. Rev E **57**, 2320 (1998)
31. F.C. Frank, J.H. van der Merwe: Proc. Roy. Soc. (London) A **198**, 205 (1949)
32. F.C. Frank, J.H. van der Merwe: Proc. Roy. Soc. (London) A **200**, 125 (1949)
33. W. Atkinson, N. Cabrera: Phys. Rev. **138**, 763 (1965)
34. A.M. Kosevich, A.S. Kovalev, In: *Radiation and Other Defects in Solids* (Inst. of Physics Publishers Tbilisi 1974) (in Russian)
35. A.S. Kovalev, A.D. Kondratyuk, A.M. Kosevich, A.I. Landau: phys. stat. sol. (b) **177**, 117 (1993)
36. O.M. Braun, V.K. Medvedev: Usp. Fiz. Nauk **157**, 631 (1989) [Sov. Phys.- Usp. **32**, 328 (1989)]
37. F. Liu, M. Lagally: Phys. Rev. Lett. **76**, 3156 (1996)
38. S.C. Erwin, A.A. Baski, L.J. Whitman, R.E. Rudd: Phys. Rev. Lett. **83**, 1818 (1999)
39. T.M. Jung, S.M. Prokes, R. Kaplan, J. Vac. Sci. Technol. A **12**, 1838 (1994)
40. A.A. Baski, S.C. Erwin, and L.J. Whitman: Surf. Sci. **423**, L265 (1999)
41. U. Harten, A.M. Lahee, J.P. Toennies, and Ch. Wöll: Phys. Rev. Lett. **54**, 2619 (1985)
42. M. Mansfield, R.J. Needs, J. Phys.: Cond. Matter **2**, 2361 (1990)
43. Y.N. Yang, B.M. Trafas, R.L. Siefert, and J.H. Weaver: Phys. Rev. B **44**, 3218 (1991)
44. P. Franzosi, G. Salviati, M. Seaffardi, F. Genova, S. Pellegrino, A. Stano: J. Cryst. Growth **88**, 135 (1988)
45. S.A. Kukushkin, A.V. Osipov: Surf. Sci. **329**, 135 (1995)
46. O.M. Braun, Yu.S. Kivshar, A.M. Kosevich, J. Phys. C **21**, 3881(1988)

47. O.M. Braun, Yu.S. Kivshar: J Phys. Cond. Mat. **2**, 5961 (1990)
48. I.F. Lyuksyutov, A.G. Naumovets, V.L. Pokrovsky, *Two-Dimensional Crystals* (Naukova Dumka Kiev 1988) [English Translation by Academic Press Boston 1992]
49. O.M. Braun, Yu.S. Kivshar, Phys. Rev. B **43**, 1060 (1991)
50. J.C. Hamilton, R. Stumpf, K. Bromann, M. Giovannini, K. Kern, H. Brune, Phys. Rev. Lett. **82**, 4488 (1999)
51. J.V. Barth, H. Brune, G. Ertl, R.J. Behm: Phys. Rev. B **42**, 9307 (1990)
52. C. Günther, J. Vrijmoeth, R.Q. Hwang, R.J. Behm: Phys. Rev. Lett. **74**, 754 (1995)
53. R. Blinc, A.P. Levanyuk: *Incommensurate Phases in Dielectrics* (North Holland Amsterdam 1986)
54. S.V. Dmitriev, K. Abe, T. Shigenari: J. Phys. Soc. Jpn. **65**, 3938 (1996)
55. S.V. Dmitriev, T. Shigenari, A.A. Vasiliev, K. Abe: Phys. Rev. B **55**, 8155 (1997)
56. F. Axel, S. Aubry, J. Phys. C **14**, 5433 (1981)
57. J.J.M. Slot, T. Janssen: Physica D **32**, 27 (1988)
58. Y. Ishibashi: J. Phys. Soc. Jpn. **60**, 212 (1991)
59. J. Hlinka, H. Orihara, and Y. Ishibashi: J. Phys. Soc. Jpn. **67**, 3488 (1988)
60. T. Janssen, *Incommensurate Phases in Dielectrics*, vol. 14.1, ed by R. Blinc, A.P. Levanyuk (North Holland Amsterdam 1986)
61. H.R. Paneth: Phys. Rev. **80**, 708 (1950)
62. Ya.I. Frenkel: *Introduction into the Theory of Metals* (Nauka Leningrad 1972) (in Russian)
63. W. Xiao, P.A. Greaney, D.C. Chrzan: Phys. Rev. Lett. **90**, 156102 (2003)
64. A.I. Landau, A.S. Kovalev, and A.D. Kondratyuk: phys. stat. sol. (b) **179**, 373 (1993)
65. A.S. Kovalev, A.D. Kondratyuk, A. M. Kosevich, A.I. Landau: Phys. Rev. B **48**, 4122 (1993)
66. M. Suezawa, K. Sumino: phys. stat. sol. (a) **36**, 263 (1976)
67. A. Sugiyama: J. Phys. Soc. Jpn. **47**, 1238 (1979)
68. W. Döring: Z. Naturf. **3**, 373 (1948)
69. R. Becker: J. Phys. Radium **12**, 332 (1951)
70. R.A. Cowley, J.D. Axe, M. Izumi: Phys. Rev. Lett. **36**, 806 (1976)
71. D.A. Bruce: J. Phys. C **14**, 5195 (1981)
72. U. Enz: Helv. Phys. Acta **37**, 245 (1964)
73. H.J. Mikeska: J. Phys. C **11**, L29 (1978)
74. A.R. Bishop, W.F. Lewis: J. Phys. C **12**, 3811 (1979)
75. A.S. Kovalev: Low Temp. Phys. **20**, 815 (1994)
76. H.J. Mikeska, M. Steiner: Adv. Phys. **40**, 191 (1991)
77. J.K. Kjems, M. Steiner: Phys. Rev. Lett. **41**, 1137 (1978)
78. L.P. Regnault, J.P. Stirling: J. Phys. C **15**, 1261 (1982)
79. M. Steiner, K. Kakurai, J.K. Kjems: Z. Phys. B **53**, 117 (1983)
80. J.P. Boucher, J.P. Renard: Phys. Rev. Lett. **45**, 486 (1980)
81. J.P. Boucher, H. Benner, F. Devreux, L.P. Regnault, J. Rossat-Mignod, C. Dupas, J.P. Renard, J. Bouillot, and W.G. Stirling: Phys. Rev. Lett. **48**, 431 (1982)
82. H. Benner, H. Seitz, J. Weise, J.P. Boucher: J. Magn. Mat. **45**, 354 (1984)
83. H. Seitz, H. Benner: Z. Phys. B **66**, 485 (1987)
84. J. Cibert, Y.M. d'Aubigné: Phys. Rev. Lett. **46**, 1428 (1981)
85. H. Benner, J. Weise, R. Geick, H. Sauer: Europhys. Lett. **3**, 1135 (1987)
86. D.W. McLaughlin, A.C. Scott: Phys. Rev. A **18**, 1652 (1978)
87. N.F. Pedersen, In: *Josephson Effect—Achievements and Trends*, ed by A. Barone (World Scientific Singapore 1986)
88. R.D. Parmentier, In: *The New Superconducting Electronics*, ed by H. Weinstock and R.W. Ralston (Kluwer, Dordrecht 1993) p. 221.
89. N.F. Pedersen, A.V. Ustinov: Supercond. Sci. Technol. **8**, 389 (1995)
90. A.V. Ustinov, R.D. Parmentier, In: *Nonlinear Physics: Theory and Experiment*, ed by E. Alfinito, M. Boiti, L. Martina, and F. Pempinelli (World Scientific Singapore 1996) p. 582
91. A.V. Ustinov: Physica D **123**, 315 (1998)
92. M.B. Mineev, G.S. Mkrtchjan, V.V. Schmidt: J. Low Temp. Phys. **45**, 497 (1981)
93. N. Grønbech-Jensen, M.R. Samuelsen, P.S. Lomdahl, J.A. Blackburn: Phys. Rev. B **42**, 3976 (1990)
94. N. Grønbech-Jensen, O.H. Olsen, M.R. Samuelsen: Phys. Lett. A **179**, 27 (1993)
95. S. Sakai, P. Bodin, N.F. Pedersen: J. Appl. Phys. **73**, 2411 (1993)
96. R. Kleiner, F. Steinmeyer, G. Kunkel, P. Müller: Phys. Rev. Lett. **68**, 2394 (1992)
97. R. Kleiner, P. Müller: Phys. Rev. B **49**, 1327(1994)
98. J.U. Lee, J.E. Nordman, G. Hohenwarter: Appl. Phys. Lett. **67**, 1471 (1995)
99. P. Binder, A.V. Ustinov: Phys. Rev. E **66**, 016603 (2002)
100. A.V. Ustinov, T. Doderer, R.P. Huebener, N.F. Pedersen, B. Mayer, V.A. Oboznov: Phys. Rev. Lett. **69**, 1815 (1992)
101. H.S.T. van der Zant, T.P. Orlando, S. Watanabe, S.H. Strogatz: Phys. Rev. Lett. **74**, 174 (1995)
102. S. Watanabe, H.S.J. van der Zant, S.H. Strogatz, T.P. Orlando: Physica D **97**, 429 (1996)
103. S. Yomosa: Phys. Rev. A **27**, 2120 (1983)
104. S. Yomosa: Phys. Rev. A **30**, 474 (1984)
105. S. Homma, S. Takeno: Progr. Theor. Phys. **72**, 679 (1984)
106. L.V. Yakushevich: Phys. Lett. A **136**, 413 (1989)

107. M. Peyrard, A.R. Bishop: Phys. Rev. Lett. **62**, 2755 (1989)
108. T. Dauxois, M. Peyrard, A.R. Bishop: Phys. Rev. E **47**, 684 (1993)
109. G.Z. Zhou, C.T. Zhang: Physica Scripta **43**, 347 (1991)
110. G. Gaeta, C. Reiss, M. Peyrard, T. Dauxois: Rivista Nuovo Cim. **17**, 1 (1994)
111. L.V. Yakushevich: *Nonlinear Physics of DNA* (Wiley Chichester 1998)
112. S.W. Englander, N. Kallenback, A. Heeger, J.A. Krumhansl, S. Litwin: Proc. Nat. Acad. Sci. **77**, 7222 (1980)
113. A.R. Bishop: J. Phys. C **11**, L329 (1978)
114. J.B. Boyce, B.A. Huberman: Phys. Rep. **51**, 189 (1979)
115. W. Dieterich, P. Fulde, I. Peschel: Adv. Phys. **29**, 527 (1980)
116. V.Ya Antonchenko, A.S. Davydov, A.V. Zolotaryuk: phys. stat. solidi (b) **115**, 631 (1983)
117. A.V. Zolotaryuk, K.H. Spatschek, E.W. Ladke: Phys. Lett. A **101**, 517 (1984)
118. A.V. Zolotaryuk: Teor. Mat. Fiz. **68**, 415 (1986) [Theor. Math. Phys. **68**, 916 (1986)]
119. M. Peyrard, St. Pnevmatikos, N. Flytzanis: Phys. Rev. A **36**, 903 (1987)
120. D. Hochstrasser, H. Bütner, H. Desfontaines, M. Peyrard: Phys. Rev. A **36**, 5332 (1988)
121. St. Pnevmatikos: Phys. Rev. Lett. **60**, 1534 (1988)
122. A.V. Zolotaryuk, St. Pnevmatikos: Phys. Lett. A **143**, 233 (1990)
123. St. Pnevmatikos, Yu.S. Kivshar, A.V. Savin, A.V. Zolotaryuk, M.J. Velgakis: Phys. Rev. A **43**, 5518 (1991)
124. A.V. Savin, A.V. Zolotaryuk: Phys. Rev. A **44**, 8167 (1991)
125. L.N. Christophorov, Yu.B. Gaididei: Phys. Lett. A **167**, 367 (1992)
126. P.L. Christiansen, A.V. Savin, A.V. Zolotaryuk: J. Comput. Phys. **134**, 108 (1997)
127. G. Kalosakas, A.V. Zolotaryuk, G.P. Tsironis, E.N. Economou: Phys. Rev. E **56**, 1088 (1997)
128. Yu.S. Kivshar: Phys. Rev. A **43**, 3117 (1991)
129. J. Pouget, G.A. Maugin: Phys. Rev. B **30**, 5306 (1984)
130. J. Pouget, G.A. Maugin: Phys. Rev. B **31**, 4633 (1995)
131. G.A. Maugin, A. Miled: Phys. Rev. B **33**, 4830 (1986)
132. B. Bhushan, J.N. Israelachvili, U. Landman: Nature **374**, 607 (1995)
133. J.B. Sokoloff: Surf. Sci. **144**, 267 (1984)
134. J.B. Sokoloff: Phys. Rev. B **42**, 760 (1990)
135. M. Weiss and F.-J. Elmer: Phys. Rev. B **53**, 7539 (1996)
136. M. Weiss and F.-J. Elmer: Z. Phys. B **104**, 55 (1997)
137. D. Cule, T. Hwa: Phys. Rev. Lett. **77**, 278 (1996)
138. D. Cule, T. Hwa: Phys. Rev. B **57**, 8235 (1998)
139. O.M. Braun, T. Dauxois, M.V. Paliy, M. Peyrard: Phys. Rev. Lett. **78**, 1295 (1997)
140. O.M. Braun, A.R. Bishop, J. Röder: Phys. Rev. Lett. **79**, 3692 (1997)
141. J. Röder, J.E. Hammerberg, B.L. Holian, A.R. Bishop: Phys. Rev. B **57**, 2759 (1998)
142. R. Peierls: Proc. Phys. Soc. (London) **52**, 34 (1940)
143. F.R.N. Nabarro: Proc. Phys. Soc. (London) **59**, 256 (1947)
144. V.L. Indenbom: Sov. Phys.- Cryst. **3**, 197 (1958)
145. V.L. Indenbom, A.N. Orlov: Sov. Phys.- Usp. **5**, 272 (1962)
146. D.J. Bergman, E. Ben-Jacob, Y. Imry, and K. Maki: Phys. Rev. A **27**, 3345 (1983)
147. R. Hobart: J. Appl. Phys. **36**, 1948 (1965)
148. R. Hobart: J. Appl. Phys. **37**, 3573 (1966)
149. V.L. Pokrovsky: J. Phys. (Paris) **42**, 761 (1981)
150. Y. Ishimori, T. Munakata: J. Phys. Soc. Jpn. **51**, 3367 (1982)
151. Y. Ishibashi, I. Suzuki: J. Phys. Soc. Jpn. **53**, 4250 (1984)
152. C.R. Willis, M. El-Batanouny, P. Stancioff: Phys. Rev. B **33**, 1904 (1986)
153. V.F. Lazutkin, I.G. Schachmannski, M.B. Tabanov: Physica D **40**, 235 (1989)
154. S. Flach, K. Kladko: Phys. Rev. E **54**, 2912 (1996)
155. B. Joos: Solid State Commun. **42**, 709 (1982)
156. K. Furuya, A.M. Ozorio de Almeida: J. Phys. A **20**, 6211 (1987)
157. R. Hobart, V. Celli: J. Appl. Phys. **33**, 60 (1962)
158. R. Hobart: J. Appl. Phys. **36**, 1944 (1965)
159. J.F. Currie, S.E. Trullinger, A.R. Bishop, J.A. Krumhansl: Phys. Rev. B **15**, 5567 (1977)
160. P. Stancioff, C.R. Willis, M. El-Batanouny, S. Burdick: Phys. Rev. B **33**, 1912 (1986)
161. S. Flach, C.R. Willis: Phys. Rev. E **47**, 4447 (1993)
162. S. De Lillo: Nuovo Cimento B **100**, 105 (1987)
163. K. Kladko, I. Mitkov, and A.R. Bishop: Phys. Rev. Lett. **84**, 4505 (2000)
164. P.G. Kevrekidis, I.G. Kevrekidis, and A.R. Bishop: Phys. Lett. A **279**, 361 (2001)
165. O.M. Braun, Yu.S. Kivshar, I.I. Zelenskaya, Phys. Rev. B **41**, 7118 (1990)
166. N. Theodorakopoulos, W. Wunderlich, R. Klein: Solid State Commun. **33**, 213 (1980)
167. V.I. Al'shits: Fiz. Tverd. Tela **11**, 2405 (1969) [Sov. Phys.-Solid State **11**, 1947 (1970)]
168. V. Celli, N. Flytzanis: J. Appl. Phys. **41**, 4443 (1970)
169. V.I. Al'shits, V.L. Indenbom, A.A. Shtol'berg: Zh. Eksp. Teor. Fiz. **60**, 2308 (1971) [Sov. Phys. JETP **33**, 1240 (1971)]
170. S. Ishioka: J. Phys. Soc. Jpn. **34**, 462 (1973)
171. M. Peyrard, M.D. Kruskal: Physica D **14**, 88 (1984)

172. R. Boesch, C.R. Willis, M. El-Batanouny: Phys. Rev. B **40**, 2284 (1989)
173. A.M. Kosevich, *The Crystal Lattice* (Wiley Berlin 1999).
174. J.A. Combs, S. Yip: Phys. Rev. B **28**, 6873 (1983)
175. R. Boesch, C.R. Willis: Phys. Rev. B **39**, 361 (1989)
176. O.M. Braun: Surface Sci. **230**, 262 (1990)
177. R. Boesch, R.P. Stancioff, C.R. Willis: Phys. Rev. B **38**, 6713 (1988)
178. A. Igarashi, T. Munakata: J. Phys. Soc. Jpn. **58**, 4025 (1989)
179. A.V. Savin, Y. Zolotaryuk, J.C. Eilbeck: Physica D **138**, 267 (2000)
180. J.C. Eilbeck, R. Flesch: Phys. Lett. A **149**, 200 (1990)
181. M.M. Bogdan, A.M. Kosevich, In: *Nonlinear Coherent Structures in Physics and Biology*, ed by K.H. Spatschek, F.G. Mertens (Plenum, New York 1994) p. 373
182. A. Champneys, Yu.S. Kivshar: Phys. Rev. E **61**, 2551 (2000)
183. G.L. Alfimov, V.G. Korolev: Phys. Lett. A **246**, 429 (1998)
184. O.M. Braun: Surface Sci. **213**, 336 (1989)
185. C.A. Condat, R.A. Guyer, M.D. Miller: Phys. Rev. B **27**, 474 (1983)
186. M. Peyrard, M. Remoissenet: Phys. Rev. B **26**, 2886 (1982)
187. M. Remoissenet, M. Peyrard: Phys. Rev. B **29**, 3153 (1984)
188. H. Segur: J. Math. Phys. **24**, 1439 (1983)
189. D.K. Campbell, J.F. Schonfeld, C.A. Wingate: Physica D **9**, 1(1983)
190. O.M. Braun, Yu.S. Kivshar, M. Peyrard: Phys. Rev. E **56**, 6050(1997)
191. Yu.S. Kivshar, D.E. Pelinovsky, T. Cretegny, M. Peyrard: Phys. Rev. Lett. **80**, 5032 (1998)
192. P.G. Kevrekidis, C.K.R.T. Jones: Phys. Rev. E **61**, 3114 (2000)
193. P.G. Kevrekidis, M.I. Weinstein: Physica D **142**, 113 (2000)
194. N.J. Balmforth, R.V. Craster, P.G. Kevrekidis: Physica D **135**, 212(2000)
195. D.K. Campbell, M. Peyrard, P. Sodano: Physica D **19**, 165 (1986)
196. J. Kurosawa: J. Appl. Phys. Suppl. **33**, 320 (1962)
197. W.T. Sanders: Phys. Rev. **128**, 1540 (1962)
198. J. Kratochvil, V.L. Indenbom: Czech. J. Phys. B **13**, 814 (1963)
199. S. Ishioka: J. Phys. Soc. Jpn. **36**, 187 (1974)
200. P. Anninos, S. Oliveira, R.A. Matzner: Phys. Rev. D **44**, 1147 (1991)
201. M. Peyrard, D.K. Campbell: Physica D **9**, 33(1983)
202. J.M. Speight, R.S. Ward: Nonlinearity **7**, 475 (1994)
203. S. Flach, Y. Zolotaryuk, K. Kladko: Phys. Rev. E **59**, 6105 (1999)
204. P. Bak: Rep. Progr. Phys. **45**, 587 (1982)
205. K. Maki, P. Kumar: Phys. Rev. B **14**, 118, 3920(1976)
206. J. Schiefman, P. Kumar: Phys. Scripta **20**, 435 (1979)
207. R. Giachetti, P. Sodano, E. Sorace, V. Tognetti: Phys. Rev. B **30**, 4014 (1984)
208. C.R. Willis, M. El-Batanouny, S. Burdick, R. Boesch: Phys. Rev. B **35**, 3496 (1987)
209. P. Sodano, M. El-Batanouny, C.R. Willis: Phys. Rev. B **34**, 4936 (1986)
210. S. Burdick, C.R. Willis, M. El-Batanouny: Phys. Rev. B **36**, 6920 (1987)
211. I.M. Lifshitz: Phys. (USSR) **7**, 215; 249 (1943)
212. I.M. Lifshitz: Phys. (USSR), **8**, 89 (1944)
213. M.A. Krivoglaz: Zh. Eksp. Teor. Fiz. **40**, 567 (1961) [Sov. Phys.-JETP **13**, 397 (1961)].
214. A.A. Maradudin: *Theoretical and Experimental Aspects of the Effects of Point Defects and Disorder on the Vibrations of Crystals* (Academic Press New York 1966)
215. S.A. Gredekskul, Yu.S. Kivshar: Phys. Rep. **216**, 1(1992)
216. K. Forinash, M. Peyrard, B.A. Malomed: Phys. Rev. E **49**, 3400 (1994)
217. D. Baeriswyl, A.R. Bishop: J. Phys. C **13**, 1403 (1980)
218. H. Reisinger, F. Schwabl: Z. Phys. B **52**, 151(1983)
219. Yu. Galpern, A. Filippov: Zh. Eksp. Teor. Fiz. **86**, 1527 (1984) [Sov. Phys. JETP **59**, 894 (1984)]
220. I. Markov, A. Trayanov: J. Phys. C **21**, 2475(1987)
221. A. Milchev: Phys. Rev. B **33**, 2062 (1986)
222. A. Milchev: Physica D **41**, 262 (1990)
223. B.A. Malomed, A. Milchev: Phys. Rev. B **41**, 4240 (1990)
224. M.B. Fogel, S.E. Trullinger, A.R. Bishop, J.A. Krumhansl: Phys. Rev. Lett. **36**, 1411 (1976)
225. M.B. Fogel, S.E. Trullinger, A.R. Bishop, J.A. Krumhansl: Phys. Rev. B **15**, 1578 (1977)
226. M.J. Rice: Phys. Rev. B **28**, 3587 (1984)
227. J.C. Fernandez, M.J. Goupil, O. Legrand, G. Reinish: Phys. Rev. B **34**, 6207 (1986)
228. P. Wofo, T.C. Kofané: Sol. State Comm. **89**, 261 (1994)
229. T.I. Belova, A.E. Kudryavtsev: Physics- Uspekhi **40**, 359 (1997)
230. J. Pouget, S. Aubry, A.R. Bishop, P.S. Lomdahl: Phys. Rev. B **39**, 9500 (1989)
231. M. Salerno, Yu.S. Kivshar: Phys. Lett. A **193**, 263(1994)
232. C.T. Zhang: Phys. Rev. A **35**, 886 (1987)
233. M. Salerno: Phys. Rev. A **44**, 5292 (1991)
234. M. Salerno: Phys. Lett. A **167**, 43 (1992)

235. M. Ricchetty, W. Metzger, H. Heuman: Proc. Nat. Acad. Sci. **84**, 4610 (1988)
236. B.A. Malomed, A.A. Nepomnyashchy: Phys. Rev. B **45**, 12435 (1992)
237. A. Kenfack, T.C. Kofané: Solid State Comm. **89**, 513 (1994)
238. F. Zhang: Phys. Rev. E **58**, 2558 (1998)
239. Yu.S. Kivshar, A. Sánchez, O.A. Chubykalo, A. M. Kosevich, L. Vázquez: J. Phys. A: Math. Gen. **25**, 5711 (1992)
240. S.A. Gredeskul, Yu.S. Kivshar, L.M. Maslov, A. Sánchez, L. Vázquez: Phys. Rev. A **45**, 8867 (1992)
241. P.J. Pascual, L. Vázquez: Phys. Rev. B **32**, 8305(1985)
242. P. Biller, F. Petruccione: Phys. Rev. B **41**, 2139 (1990)
243. P. Biller, F. Petruccione: Phys. Rev. B **41**, 2145 (1990)
244. F.G. Bass, Yu.S. Kivshar, V.V. Konotop, Yu.A. Sinitsyn: Phys. Rep. **157**, 63 (1988)
245. A. Sánchez, L. Vázquez: Int. J. Mod. Phys. B **5**, 2825 (1992)
246. J. Lothe, J.P. Hirth: Phys. Rev. **115**, 543(1959)
247. P.A. Kazantsev, V.L. Pokrovsky: Zh. Eksp. Teor. Fiz. **58**, 677 (1968) [Sov. Phys.-JETP **31**, 362 (1970)]
248. J.R. Patel, A.R. Chandhuri: Phys. Rev. **143**, 601 (1966)
249. V.N. Erofeev, V.I. Nikitenko: Fiz. Tverd. Tela **13**, 146 (1971) [Sov. Phys.- Solid State **13**, 116 (1971)].
250. B.V. Petukhov: Fiz. Tverd. Tela **13**, 1445 (1971) [Sov. Phys.- Solid State **13**, 1207 (1971)].
251. B.V. Petukhov: Fiz. Tverd. Tela **25**, 1822 (1983) [Sov. Phys.- Solid State **25**, 1048 (1983)].
252. V.M. Vinokur: J. Physique (Paris) **47**, 1425 (1986)
253. I.R. Sagdeev, V.M. Vinokur: J. Physique (Paris) **48**, 1395(1987)
254. J.A. González, J.A. Holyst: Phys. Rev. B **45**, 10338 (1992)
255. J.A. González, B. de A. Mello: Phys. Lett. A **219**, 226 (1996)
256. J.A. Holyst: Phys. Rev. E **57**, 4786 (1998)
257. J.A. González, A. Bellorín, L.E. Guerrero: Phys. Rev. E **60**, R37 (1999)
258. T.L. Einstein: CRC Crit. Rev. Solid State and Mater. Sci. **7**, 261 (1978)
259. O.M. Braun: Fiz. Tverd. Tela **23**, 2779 (1981) [Sov. Phys.- Solid State **23**, 1626 (1981)].
260. M.A. Vorotyntsev, A.A. Kornyshev, A.I. Rubinshtein: Dokl. Akad. Nauk SSSR **248**, 1321 (1979) [Sov. Phys. Dokl. **24**, 848 (1979)].
261. L.A. Bol'shov, A.P. Napartovich, A.G. Naumovets, A.G. Fedorus: Usp. Fiz. Nauk **122**, 125 (1977) [Sov. Phys.- Usp. **20**, 412 (1977)]
262. A. Milchev, I. Markov: Surface Sci. **136**, 503 (1984)
263. I. Markov, A. Milchev: Thin Solid Films **126**, 83 (1985)
264. O.M. Braun, F. Zhang, Yu.S. Kivshar, L. Vázquez: Phys. Lett. A **157**, 241 (1991)
265. F. Zhang: Phys. Rev. E **54**, 4325 (1996)
266. A. Milchev, G.M. Mazzucchelli: Phys. Rev. B **38**, 2808 (1988)
267. A. Milchev, Th. Fraggis, St. Pnevmatikos: Phys. Rev. B **45**, 10348 (1992)
268. M. Toda: J. Phys. Soc. Jpn. **22**, 431 (1967)
269. M. Toda: J. Phys. Soc. Jpn. **23**, 501 (1967)
270. M. Toda: *Theory of Nonlinear Lattices* (Springer-Verlag Berlin 1981).
271. A.V. Savin: Zh. Eksp. Teor. Fiz. **108**, 1105 (1995) [JETP **81**, 608 (1995)]
272. Y. Zolotaryuk, J.C. Eilbeck, A.V. Savin: Physica D **108**, 81 (1997)
273. A.M. Kosevich, A.S. Kovalev: Solid State Commun. **12**, 763(1973)
274. K. Konno, W. Kameyama, H. Sanuki: J. Phys. Soc. Jpn. **37**, 171 (1974)
275. C. Haas: Solid State Commun. **26**, 709 (1978)
276. R.B. Griffiths, W. Chou: Phys. Rev. Lett. **56**, 1929 (1986)
277. R.B. Griffiths, In: *Fundamental Problems in Statistical Mechanics-VII*, ed by H. van Beijeren (Elsevier Science Publishers Amsterdam 1990) p. 69
278. S. Marianer, L.M. Floria: Phys. Rev. B **38**, 12054 (1988)
279. J.E. Byrne, M.D. Miller: Phys. Rev. B **39**, 374 (1989)
280. M. Marchand, K. Hood, A. Caillé: Phys. Rev. Lett. **58**, 1660 (1987)
281. S. Takeno, S. Homma: J. Phys. Soc. Jpn. **55**, 65 (1986)
282. C.S.O. Yokoi, L.-H. Tang, W. Chou: Phys. Rev. B **37**, 2173 (1988)
283. S. Marianer, A.R. Bishop: Phys. Rev. B **37**, 9893 (1988)
284. G.R. Barsch, J.A. Krumhansl: Phys. Rev. Lett. **53**, 1069 (1984)
285. G.R. Barsch, B. Horovitz, and J.A. Krumhansl: Phys. Rev. Lett. **59**, 1251 (1987)
286. S. Marianer, A.R. Bishop, and J. Pouget, In: *Competing Interactions and Microstructures: Statics and Dynamics*, ed by R. Lesar, A.R. Bishop, R. Heffner, Springer Proceedings in Physics, Vol. 27 (Springer-Verlag Berlin 1988)
287. J.J.M. Slot, T. Janssen: J. Phys. A: Math. Gen. **21**, 3559 (1988)
288. S.K. Sarker, J.A. Krumhansl: Phys. Rev. B **23**, 2374 (1981)
289. M. Remoissenet, N. Flytzanis: J. Phys. C **18**, 1573 (1985)
290. M. Croitoru: J. Phys. A: Math. Gen. **22**, 845(1989)
291. P. Wofo, J.P. Kenne, T.C. Kofané: J. Phys.: Cond. Matter **5**, L123 (1993)
292. G.A. Baker: Phys. Rev. **122**, 1477 (1961)
293. A.M. Kac, E. Helfand: J. Math. Phys. **4**, 1078 (1973)
294. S.F. Mingaleev, Yu.B. Gaididei, E. Majernikova, S. Shpyrko: Phys. Rev. E **61**, 4454 (2000)
295. V.L. Pokrovsky, A. Virosztek: J. Phys. C **16**, 4513 (1983)

296. J.C. Wang, D.F. Pickett: J. Chem. Phys. **65**, 5378 (1976)
297. M.B. Gordon, J. Villain: J. Phys. C **12**, L151 (1979)
298. I.F. Lyuksyutov: Zh. Eksp. Teor. Fiz. **82**, 1267(1982) [Sov. Phys.-JETP **55**, 737 (1982)].
299. A.L. Talapov: Zh. Eksp. Teor. Phys. **83**, 442 (1982)
300. F.D.M. Haldane, J. Villain: J. Physique (Paris) **42**, 1673 (1981)
301. Yu.M. Aliev, K.N. Ovchinnikov, V.P. Silin, S.A. Uryupin: Zh. Eksp. Teor. Fiz. **107**, 972 (1995) [JETP **80**, 551 (1995)].
302. G.L. Alfimov, V.M. Eleonsky, N.E. Kulagin, N.V. Mitzkevich: Chaos **3**, 405 (1993)
303. P. Rosenau, J.M. Hyman: Phys. Rev. Lett. **70**, 564(1993)
304. V.V. Konotop, S. Takeno: Phys. Rev. E **60**, 1001 (1999)
305. Yu.S. Kivshar: Phys. Rev. E **48**, 43 (1993)
306. P.T. Dinda, T.C. Kofane, M. Remoissenet: Phys. Rev. E **60**, 7525 (1999)
307. Yu.S. Kivshar, B.A. Malomed: Europhys. Lett. **4**, 1215 (1987)
308. K.Ø. Rasmussen, A.R. Bishop, N. Grønbech-Jensen: Phys. Rev. E **58**, R40 (1998)
309. F. Geniet, J. Leon: Phys. Rev. Lett. **89**, 134102 (2002)
310. D.A. Semagin, A.M. Kosevich, T. Shigenari: Physica B **316-317**, 170 (2002)
311. R. Boesch, M. Peyrard: Phys. Rev. B **43**, 8491 (1991)
312. S.V. Dmitriev, T. Shigenari, K. Abe, A.A. Vasiliev, A.E. Miroshnichenko: Comput. Mat. Sci. **18**, 303 (2000)
313. A.M. Kosevich and A.S. Kovalev: Sov. Phys.-JETP **67**, 1793 (1974)
314. M. Remoissenet: Phys. Rev. B **33**, 2386 (1986)
315. O. Bang, M. Peyrard: Physica D **81**, 9 (1995)
316. J. Denzler: Commun. Math. Phys. **158**, 397 (1993)
317. B. Birnir: Comm. Pure Appl. Math. **157**, 103 (1994)
318. J. Geike: Phys. Rev. E **49**, 3539 (1994)
319. O.M. Braun, Yu.S. Kivshar: Phys. Rep. **306**, 1 (1998)
320. P.G. Kevrekidis, A. Saxena, A.R. Bishop: Phys. Rev. E **64**, 026613 (2001)
321. S.V. Dmitriev, T. Shigenari, A.A. Vasiliev, A.E. Miroshnichenko: Phys. Lett. A **246**, 129 (1998)
322. S.V. Dmitriev, T. Miyauchi, K. Abe, T. Shigenari: Phys. Rev. E **61**, 5880 (2000)
323. A.E. Miroshnichenko, S.V. Dmitriev, A.A. Vasiliev, T. Shigenari: Nonlinearity **13**, 837 (2000)
324. S.V. Dmitriev, Yu.S. Kivshar, T. Shigenari: Phys. Rev. E **64**, 056613 (2001)
325. S.V. Dmitriev, Yu.S. Kivshar, T. Shigenari: Physica B **316-317**, 139 (2002)
326. Yu.S. Kivshar, F. Zhang, L. Vázquez: Phys. Rev. Lett. **67**, 1177 (1991)
327. S.V. Dmitriev, Yu.S. Kivshar: unpublished (2003)
328. A.M. Kosevich, A.S. Kovalev: Fiz. Nizk. Temp. **1**, 1544 (1975) [Sov. J. Low Temp. Phys. **1**, 742 (1975)]
329. A.D. Boardman, V. Bortolani, R.F. Willis, K. Xie, H.M. Mehta: Phys. Rev. B **52**, 12736 (1995)
330. Yu.S. Kivshar, B.A. Malomed: J. Phys. A: Math. Gen. **21**, 1553 (1988)
331. A.S. Kovalev, F. Zhang, Yu.S. Kivshar: Phys. Rev. B **51**, 3218 (1995)
332. J.A.D. Wattis, S.A. Harris, C.R. Grindon, C.A. Laughton: Phys. Rev. E **63**, 061903 (2001)
333. M.M. Bogdan, A.S. Kovalev, I.V. Gerasimchuk: Fiz. Nizk. Temp. **23**, 197 (1997) [Low Temp. Phys. **23**, 145 (1997)]
334. N.G. Vakhitov, A.A. Kolokolov: Izv. VUZov Radiofiz. **16**, 1020 (1973) [Radiophys. Quant. Electron. **16**, 783 (1973)]
335. A.A. Sukhorukov, Yu.S. Kivshar, O. Bang, J.J. Rasmussen, P.L. Christiansen: Phys. Rev. E **63**, 036601 (2001)
336. Yu.S. Kivshar, F. Zhang, and A.S. Kovalev: Phys. Rev. B **55**, 14265 (1997)
337. T. Fraggis, St. Pnevmatikos, E.N. Economou: Phys. Lett. A **142**, 361 (1989)
338. F. Zhang, Yu.S. Kivshar, B.A. Malomed, L. Vázquez: Phys. Lett. A **159**, 318 (1991)
339. F. Zhang, Yu.S. Kivshar, L. Vázquez: Phys. Rev. A **45**, 6019 (1992)
340. F. Zhang, F., Yu.S. Kivshar, L. Vázquez: Phys. Rev. A **46**, 5214 (1992)
341. F. Zhang, Yu.S. Kivshar, L. Vázquez: J. Phys. Soc. Jpn. **63**, 466 (1994)
342. B.A. Malomed, D.K. Campbell, N. Knowles, and R.J. Flesh: Phys. Lett. A **178**, 271 (1993)
343. T.I. Belova, A.E. Kudryavtsev: Zh. Eksp. Teor. Fiz. **108**, 1489 (1995) [JETP **81**, 817 (1995)]
344. A. Tsurui: J. Phys. Soc. Jpn. **34**, 1462 (1973)
345. B.A. Malomed: J. Phys. A: Math. Gen. **25**, 755 (1992)
346. W. Chen, Y. Zhu, L. Lu: Phys. Rev. B **67**, 184301 (2003)
347. A.A. Maradudin, E.W. Montroll, G.H. Weiss: *Lattice Dynamics in the Harmonic Approximation* (Academic New York 1963)
348. P.W. Anderson: Phys. Rev. **109**, 1492 (1958)
349. A.S. Dolgov: Sov. Phys. Solid State **28**, 907 (1986)
350. A.J. Sievers, S. Takeno: Phys. Rev. Lett. **61**, 970 (1988)
351. S. Takeno, K. Kisoda, A.J. Sievers: Progr. Theor. Phys. Suppl. No. **94**, 242 (1988)
352. J.B. Page: Phys. Rev. B **41**, 7835 (1990)
353. V.M. Burlakov, S.A. Kiselev, V.N. Pyrkov: Sol. State Commun. **74**, 327 (1990)
354. V.M. Burlakov, S.A. Kiselev, V.N. Pyrkov: Phys. Rev. B **42**, 4921 (1990)
355. S. Takeno, K. Hori: J. Phys. Soc. Jpn. **59**, 3037 (1990)
356. S.R. Bickham, A.J. Sievers: Phys. Rev. B **43**, 2339 (1991)
357. Yu.S. Kivshar: Phys. Lett. A **161**, 80 (1991)
358. R. Scharf, A.R. Bishop: Phys. Rev. A **43**, 6535 (1991)
359. S.R. Bickham, A.J. Sievers, S. Takeno: Phys. Rev. B **45**, 10344 (1992)

360. K.W. Sandusky, J.B. Page, and K.E. Schmidt: Phys. Rev. B **46**, 6161 (1992)
361. K. Hori, S. Takeno: J. Phys. Soc. Jpn. **61**, 4263 (1992)
362. T. Dauxois, M. Peyrard: Phys. Rev. Lett. **70**, 3935 (1993)
363. T. Dauxois, M. Peyrard, C.R. Willis: Phys. Rev. E **48**, 4768 (1993)
364. S.A. Kiselev, S.R. Bickham, A.J. Sievers: Phys. Rev. B **48**, 13508 (1993)
365. Yu.S. Kivshar: Phys. Lett. A **173**, 172(1993)
366. Yu.S. Kivshar: Phys. Rev. E **48**, 4132 (1993)
367. S. Flach, K. Kladko, C.R. Willis: Phys. Rev. E **50**, 2293 (1994)
368. O. Bang, M. Peyrard: Phys. Rev. E **53**, 4143 (1996)
369. S. Takeno, M. Peyrard: Physica D **92**, 140 (1996)
370. K. Forinash, T. Creteigny, M. Peyrard: Phys. Rev. E **55**, 4740 (1997)
371. A.J. Sievers, J.B. Page, In: *Dynamical Properties of Solids VII. Phonon Physics: The Cutting Edge*, ed by G.K. Horton, A.A. Maradudin (Elsevier Amsterdam 1995) p. 137
372. S.A. Kiselev, S.R. Bickham, A.J. Sievers: Comm. Cond. Mat. Phys. **17**, 135 (1995)
373. S. Flach, C.R. Willis: Phys. Rep. **295** 181 (1998)
374. R.S. MacKay, S. Aubry: Nonlinearity **7**, 1623(1994)
375. S. Aubry: Physica D **71**, 196 (1994)
376. R.S. MacKay: Physica A **288**, 174 (2000)
377. R. Bourbonnais, R. Maynard: Phys. Rev. Lett. **64**, 1397 (1990)
378. R. Bourbonnais, R. Maynard: Int. J. Mod. Phys. **1**, 233 (1990)
379. Ch. Claude, Yu.S. Kivshar, O. Kluth, K.H. Spatschek: Phys. Rev. B **47** 14228 (1993)
380. S. Flach: Phys. Rev. E **51**, 3579 (1995)
381. Yu.S. Kivshar, D.K. Campbell: Phys. Rev. E **48**, 3077 (1993)
382. D. Cai, A.R. Bishop, N. Grønbech-Jensen: Phys. Rev. Lett. **72**, 591 (1994)
383. R.S. MacKay, J.-A. Sepulchre: Physica D **82**, 243 (1995)
384. S. Aubry: Physica D **103**, 201 (1997)
385. J.-A. Sepulchre, R.S. MacKay: Nonlinearity **10**, 679 (1997)
386. S. Aubry: Ann. Inst. H. Poincaré, Phys. Théor. **68**, 381 (1998)
387. J.C. Eilbeck, P.S. Lomdahl, A.C. Scott: Physica D **16**, 318(1985)
388. J. Carr, J.C. Eilbeck: Phys. Lett. A **109**, 201 (1985)
389. A. Scott: Philos. Trans. R. Soc. (London) A **315**, 423 (1985)
390. H. Willaime, O. Cardoso, P. Tabeling: Phys. Rev. Lett. **67**, 970 (1991)
391. A.C. Scott, P.L. Christiansen: Phys. Scripta **42**, 257(1990)
392. O. Bang, J.J. Rasmussen, P.L. Christiansen: Physica D **68**, 169(1993)
393. O. Bang, J.J. Rasmussen, P.L. Christiansen: Nonlinearity **7**, 205(1994)
394. B.A. Malomed, M.I. Weinstein: Phys. Lett. A **220**, 91(1996)
395. B.C. Gupta, K. Kundu: Phys. Lett. A **235**, 176 (1997)
396. V.I. Bespalov, V.I. Talanov: Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. **3**, 471 (1966) [JETP Lett. **3**, 307 (1966)].
397. T.B. Benjamin, J.E. Feir: J. Fluid. Mech. **27**, 417 (1967)
398. L.A. Ostrovskii: Zh. Eksp. Teor. Fiz. **51**, 1189 (1967) [Sov. Phys. JETP **24**, 797 (1967)]
399. A. Hasegawa: Phys. Rev. Lett. **24**, 1165 (1970)
400. Yu.S. Kivshar, M. Peyrard: Phys. Rev. A **46**, 3198 (1992)
401. I. Daumont, T. Dauxois, M. Peyrard: Nonlinearity **10**, 617(1997)
402. Yu.S. Kivshar, M. Salerno: Phys. Rev. E **49**, 3543 (1994)
403. V.I. Karpman: Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. **6**, 829 (1967) [JETP Lett. **6**, 277 (1967)].
404. S. Flach, C.R. Willis: Phys. Rev. Lett. **72**, 1777 (1994)
405. W. Krolikowski, Yu.S. Kivshar: J. Opt. Soc. Am. B **13**, 876 (1996)
406. M.J. Ablowitz, J.F. Ladik: J. Math. Phys. **17**, 1011 (1976)
407. M. Salerno: Phys. Rev. A **46**, 6856 (1992)
408. A.A. Vakhnenko, Yu.B. Gaididei: Theor. Mat. Fiz. **68**, 350 (1986) [Theor. Math. Phys. **68**, 873 (1987)]
409. Yu.S. Kivshar: Phys. Rev. B **46**, 8652 (1992)
410. S.J. Putterman, P.H. Roberts: Proc. R. Soc. (London) **440**, 135 (1993)
411. G. Huang, J. Shen, H. Quan: Phys. Rev. B **48**, 16795 (1993)
412. Yu.S. Kivshar, W. Krolikowski, O.A. Chubykalo: Phys. Rev. E **50**, 5020 (1994)
413. B. Denardo, B. Galvin, A. Greenfield, A. Larraza, S. Putterman, W. Wright: Phys. Rev. Lett. **68**, 1730 (1992)
414. S.-Y. Lou, G. Huang: Mod. Phys. Lett. B **9**, 1231 (1995)
415. V. Bortolani, A. Franchini, R.F. Willis: Phys. Rev. B **56**, 8047 (1997)
416. M. Johansson, Yu.S. Kivshar: Phys. Rev. Lett. **82**, 85 (1999)
417. S. Takeno, M. Peyrard: Phys. Rev. E **55**, 1922 (1997)
418. F. Fischer: Ann. Physik **2**, 296 (1993)
419. S. Takeno: J. Phys. Soc. Jpn. **61**, 2821 (1992)
420. S. Flach, K. Kladko, S. Takeno: Phys. Rev. Lett. **79**, 4838 (1997)
421. S. Flach, C.R. Willis, E. Olbrich: Phys. Rev. E **49**, 836 (1994)
422. J.M. Tamga, M. Renmoissenet, J. Pouget: Phys. Rev. Lett. **75**, 357 (1995)
423. J. Pouget, M. Remoissenet, J.M. Tamga, 1993, Phys. Rev. E **47**, 14866 (1993)

424. S. Flach, K. Kladko, R.S. MacKay: Phys. Rev. Lett. **78**, 1207 (1997)
425. P.G. Kevrekidis, K.Ø. Rasmussen, A.R. Bishop: Phys. Rev. E **61**, 2006 (2000)
426. D. Bonart, A.P. Mayer, U. Schröder: Phys. Rev. Lett. **75**, 870 (1995)
427. J.-H. Choy, S.-J. Kwon, G.S. Park: Science **280**, 1589 (1998)
428. J.-P. Locquet, J. Perret, J. Fompeyrine, E. Mächler, J.W. Seo, G. Van Tendeloo, Nature **394**, 453 (1998)
429. J.L. Marэн, J.C. Eilbeck, F.M. Russell: Phys. Lett. A **281**, 21 (2001)
430. J.L. Marэн, J.C. Eilbeck, F.M. Russell: Phys. Lett. A **248**, 225 (1998)
431. S. Takeno, K. Kawasaki: J. Phys. Soc. Jpn. **60**, 1881 (1991)
432. S. Takeno, K. Kawasaki: Phys. Rev. B **45**, 5083 (1992)
433. R.F. Wallis, D.L. Mills, A.D. Boardman: Phys. Rev. B **52**, R3828 (1995)
434. R. Lai, A.J. Sievers: Phys. Rep. **314**, 147 (1999)
435. U.T. Schwarz, L.Q. English, A.J. Sievers: Phys. Rev. Lett. **83**, 223 (1999)
436. P. Binder, D. Abramov, A.V. Ustinov, S. Flach, Y. Zolotaryuk: Phys. Rev. Lett. **84**, 745 (2000)
437. E. Trias, J.J. Mazo, T.P. Orlando: Phys. Rev. Lett. **84**, 741 (2000)
438. H.S. Eisenberg, Y. Silberberg, R. Morandotti, A.R. Boyd, J.S. Aitchison: Phys. Rev. Lett. **81**, 3383 (1998)
439. A.A. Sukhorukov, Yu.S. Kivshar, H.S. Eisenberg, Y. Silberberg: IEEE J. Quantum Electron. **39**, 31 (2003)
440. Yu.S. Kivshar and G.P. Agrawal: *Optical Solitons: From Fibers to Photonic Crystals* (Academic San Diego 2003), 560 pp.
441. F.M. Russell, Y. Zolotaryuk, J.C. Eilbeck, T. Dauxois: Phys. Rev. B **55**, 6304 (1997)
442. C. Baesens, R.S. MacKay: Physica D **69**, 59 (1993)
443. S. Aubry, P.Y. Le Daeron: Physica D **8**, 381 (1983)
444. B. Mandelbrot: *Fractals* (Freeman San Francisco 1977)
445. W. Chou, R.B. Griffiths: Phys. Rev. B **34**, 6219 (1986)
446. C.S. Ying: Phys. Rev. B **3**, 4160 (1971)
447. J.B. Sokoloff: Phys. Rev. B **16**, 3367 (1977)
448. S. Aubry, In: *Solitons and Condensed Matter Physics*, ed by A.R. Bishop, T. Schneider, Solid State Sciences Vol. 8 (Springer Berlin 1978), p. 264
449. S. Aubry, In: *Some Non-Linear Physics in Crystallographic Structure*, Lecture Notes in Physics Vol. 93 (Springer Berlin 1979) p. 201
450. S. Aubry: Ferroelectrics **24**, 53 (1980)
451. S. Aubry: In: *Physics of Defects, Les Houches, Session XXXV*, ed by R. Balian, M. Kleman, J.P. Poirier (North-Holland, Amsterdam 1980), p. 431
452. S. Aubry, 1981, In: *Symmetries and Broken Symmetries*, ed by N. Boccara (Idset Paris 1981), p. 313
453. S. Aubry, In: *Numerical Methods in the Study of Critical Phenomena*, ed by J. Della Dora, J. Demongeot, B. Lacolle (Springer Berlin 1981), p. 78
454. S. Aubry, In: *The Devil's Staircase Transformation in Incommensurate Lattices*, Vol. 925 of Lecture Notes in Mathematics (Springer Berlin 1982), p. 221.
455. L.N. Bulaevsky, D.I. Chomsky: Zh. Eksp. Teor. Fiz. **74**, 1863 (1978)
456. G. Theodorou, T.M. Rice: Phys. Rev. B **18**, 2840 (1978)
457. V.L. Pokrovsky, A.L. Talapov: Zh. Exp. Theor. Fiz. **75**, 1151 (1978)
458. J.E. Sacco, J.B. Sokoloff: Phys. Rev. B **18**, 6549 (1978)
459. P. Bak: Phys. Rev. Lett. **46**, 791 (1981)
460. S. Aubry: Physica D **7**, 240 (1983)
461. W. Selke, In: *Phase Transitions and Critical Phenomena*, ed by C. Domb, J.L. Lebowitz (Academic Press New York 1992), p. 1
462. M. Hupalo, J. Schmalian, M.C. Tringides: Phys. Rev. Lett. **90**, 216106 (2003)
463. M. Peyrard, S. Aubry: J. Phys. C **16**, 1593 (1983)
464. S.L. Shumway, J.P. Sethna: Phys. Rev. Lett. **67**, 995 (1991)
465. H.J. Schellnhuber, H. Urbschat, A. Block: Phys. Rev. A **33**, 2856 (1986)
466. H.J. Schellnhuber, H. Urbschat, J. Wilbrink: Z. Phys. B **80**, 305 (1990)
467. B. Lin, B. Hu: J. Stat. Phys. **69**, 1047 (1992)
468. J.D. Meiss: Rev. Mod. Phys. **64**, 795 (1992)
469. B.V. Chirikov: Atomnaya Energiya **6**, 630 (1959)
470. B.V. Chirikov: Phys. Rep. **52**, 263 (1979)
471. J.M. Greene: J. Math. Phys. **20**, 1183 (1979)
472. J.M. Greene, R.S. MacKay, F. Vivaldi, M.J. Feigenbaum: Physica D **3**, 468 (1981)
473. A.J. Lichtenberg, M.A. Lieberman: *Regular and Stochastic Motion* (Springer Berlin 1983).
474. H.G. Schuster: *Deterministic Chaos. An Introduction* (Physik-Verlag Weinheim 1984)
475. S.J. Shenker, L.P. Kadanoff: J. Stat. Phys. **27**, 631 (1982)
476. R.S. MacKay: *Renormalization in Area-Preserving Maps* (World Scientific, Singapore 1993)
477. L.-H. Tang, R.B. Griffiths: J. Stat. Phys. **53**, 853 (1988)
478. K. Sasaki, L.M. Floría: J. Phys. C **1**, 2179 (1989)
479. B. Joos, B. Bergersen, R.J. Gooding, M. Plischke: Phys. Rev. B **27**, 467 (1983)
480. E. Burkov, B.E.C. Koltenbach, L.W. Bruch: Phys. Rev. B **53**, 14179 (1996)
481. J.A. Ketoja, I.I. Satija: Physica D **104**, 239 (1997)
482. P. Tong, B. Li, B. Hu: Phys. Rev. B **59**, 8639 (1999)

483. B. Hu, B. Li, H. Zhao: Phys. Rev. E **61**, 3829 (2000)
484. B. Sutherland: Phys. Rev. A **8**, 2514 (1973)
485. W.L. McMillan: Phys. Rev. B **16**, 4655 (1977)
486. A.D. Novaco: Phys. Rev. B **22**, 1645 (1980)
487. L.M. Floría, J.J. Mazo: Adv. Phys. **45**, 505(1996)
488. R.C. Black, I.I. Satija: Phys. Rev. B **44**, 4089 (1991)
489. S.N. Coppersmith, D.S. Fisher: Phys. Rev. B **28**, 2566 (1983)
490. S.R. Sharma, B. Bergersen, B. Joos: Phys. Rev. B **29**, 6335 (1984)
491. L. de Seze, S. Aubry: J. Phys. C **17**, 389 (1984)
492. S. Aubry, P. Quemerais, In: *Low Dimensional Electronic Properties of Molybdenum Bronzes and Oxides*, ed by C. Schlenker (Kluwer Dordrecht 1984)
493. R.S. MacKay: Physica D **50**, 71 (1991)
494. O. Biham, D. Mukamel: Phys. Rev. A **39**, 5326 (1989)
495. L. Consoli, H.J.F. Knops, A. Fasolino: Phys. Rev. Lett. **85**, 302 (2000)
496. R.A. Guyer, M.D. Miller: Phys. Rev. A **17**, 1774 (1978)
497. R.A. Guyer, M.D. Miller: Phys. Rev. Lett. **42**, 718 (1979)
498. L.A. Bol'shov: Fiz. Tverd. Tela **13**, 1679 (1971)
499. P. Bak, R. Bruinsma: Phys. Rev. Lett. **49**, 249 (1982)
500. Ya.G. Sinai, S.E. Burkov: Uspechi Mat. Nauk **38**, 205(1983)
501. I. Dzyaloshynsky: Zh. Eksp. Teor. Fiz. **47**, 992 (1964)
502. W.L. McMillan: Phys. Rev. B **14**, 1496 (1976)
503. J. Villain, In: *Ordering in Strongly Fluctuating Condensed Matter Systems*, ed by T. Riste (New York Plenum 1980) p. 222
504. J.P. McTague, M. Nielsen, L. Passel, In: *Ordering in Strongly Fluctuating Condensed Matter Systems*, ed by T. Riste (New York Plenum 1980) p. 195.
505. S. Iwabuchi: Prog. Theor. Phys. **70**, 941 (1983)
506. R.C. Black, I.I. Satija: Phys. Rev. Lett. **65**, 1 (1990)
507. I. Markov, A. Milchev: Surface Sci. **136**, 519 (1984)
508. I. Markov, A. Milchev: Surface Sci. **145**, 313(1984)
509. A. Milchev, I. Markov: Surface Sci. **156**, 392(1985)
510. S. Aubry, K. Fesser, A.R. Bishop: J. Phys. A **18**, 3157 (1985)
511. M.D. Miller, J.S. Walker: Phys. Rev. B **44**, 2792 (1991)
512. I. Markov, A. Trayanov: J. Phys. C **21**, 2475(1988)
513. I. Markov, A. Trayanov: J. Phys.: Cond. Mat. **2**, 6965(1990)
514. K. Ploog, W. Stolz, L. Tapfer, In: *Thin Film Growth Techniques for Low-Dimensional Structures* (New York, Plenum 1987) p. 5.
515. C.G. Goedde, A.J. Lichtenberg, M.A. Liberman: Physica D **59**, 200 (1992)
516. R.E. Peierls: Helv. Phys. Acta **7**, 81 (1934)
517. J.A. Krumhansl, J.R. Schrieffer: Phys. Rev. B **11**, 3535 (1975)
518. T. Schneider, In: *Solitons*, ed by S.E. Trullinger, V.E. Zakharov, V.L. Pokrovsky (Springer-Verlag Berlin 1986) Chap. 7
519. T. Tsuzuki, K. Sasaki: Progr. Theor. Phys. Suppl. **94**, 73 (1988)
520. T. Schneider, E. Stoll: Phys. Rev. B **22**, 5317 (1980)
521. R.A. Guyer, M.D. Miller: Phys. Rev. B **20**, 4748 (1979)
522. P.W. Anderson, B.I. Halperin, C.M. Varma: Philos. Mag. **25**, 1 (1972)
523. W.A. Phillips: J. Low Temp. Phys. **7**, 351 (1972)
524. S.N. Coppersmith: Phys. Rev. A **36**, 3375 (1987)
525. H.U. Beyeler, L. Pietronero, S. Strässler: Phys. Rev. B **22**, 2988(1980)
526. L. Pietronero, S. Strässler: Phys. Rev. Lett. **42**, 188 (1979)
527. P. Reichert, R. Schilling: Phys. Rev. B **32**, 5731 (1985)
528. F. Vallet, R. Schilling, S. Aubry: Europhys. Lett. **2**, 815(1986)
529. F. Vallet, R. Schilling, S. Aubry: J. Phys. C **21**, 67 (1988)
530. O.V. Zhirov, G. Casati, D.L. Shepelyansky: Phys. Rev. E **65**, 26220(2002)
531. L. Pietronero, W.R. Schneider, S. Strässler: Phys. Rev. B **24**, 2187(1981)
532. H.V. Löhneysen, H.J. Schink, W. Arnold, H.U. Beyeler, L. Pietronero, S. Strässler: Phys. Rev. Lett. **46**, 1213 (1981)
533. J.F. Currie, J.A. Krumhansl, A.R. Bishop, S.E. Trullinger: Phys. Rev. B **22**, 477 (1980)
534. S.E. Trullinger: Phys. Rev. B **22**, 418 (1980)
535. K. Sasaki: Phys. Rev. B **33**, 2214 (1986)
536. H. Takayama, K. Maki: Phys. Rev. B **20**, 5002 (1979)
537. H. Takayama, K. Maki: Phys. Rev. B **21**, 4558 (1980)
538. H. Takayama, K. Wada: J. Phys. Soc. Jpn. **50**, 3549 (1981)
539. N. Theodorakopoulos: Z. Phys. B **46**, 367(1982)
540. N. Theodorakopoulos: Phys. Rev. B **30**, 4071(1984)
541. N. Theodorakopoulos, E.W. Weller: Phys. Rev. B **37**, 6200 (1988)
542. E. Tomboulis: Phys. Rev. D **12**, 1678 (1975)
543. T. Miyashita, K. Maki: Phys. Rev. B **28**, 6733 (1983)
544. T. Miyashita, K. Maki: Phys. Rev. B **31**, 1836 (1985)

545. M. Fukuma, S. Takada: J. Phys. Soc. Jpn. **55**, 2701 (1986)
546. K. Sasaki: Prog. Theor. Phys. **70**, 593 (1983)
547. K. Sasaki: Prog. Theor. Phys. **71**, 1169 (1984)
548. S.E. Trullinger, K. Sasaki: Physica D **28**, 181 (1987)
549. C.R. Willis, R. Boesch: Phys. Rev. B **41**, 4570 (1990)
550. D.J. Scalapino, M. Sears, R.A. Ferrell: Phys. Rev. B **6**, 3409 (1972)
551. N. Gupta, B. Sutherland: Phys. Rev. A **14**, 1790 (1976)
552. M.J. Gillan, R.W. Holloway: J. Phys. C **18**, 4903(1985)
553. M.J. Gillan, R.W. Holloway: J. Phys. C **18**, 5705(1985)
554. J.E. Sacco, A. Widom, J.B. Sokoloff: J. Stat. Phys. **21**, 497 (1979)
555. W. Kohn: Phys. Rev. **115**, 809 (1959)
556. M. Abramowitz, I.A. Stegun: *Handbook of Mathematical Functions* (US Dept. of Commerce Washington 1972)
557. M. Croitoru, D. Grecu, A. Visinescu, V. Cionga: Rev. Roum. Phys. **29**, 853(1984)
558. S. Goldstein: Proc. R. Soc. Edinburgh T **49**, 210 (1929)
559. R.M. De Leonardis, S.E. Trullinger: Phys. Rev. A **20**, 2603 (1979)
560. Y. Okwamoto, H. Takayama, H. Shiba: J. Phys. Soc. Jpn. **46**, 1420 (1979)
561. K. Sasaki: Prog. Theor. Phys. **67**, 464 (1982)
562. K. Sasaki, T. Tsuzuki: Solid State Commun. **41**, 521 (1982)
563. K. Sasaki: Prog. Theor. Phys. **68**, 411 (1984)
564. K. Sasaki: Phys. Rev. B **33**, 7743 (1986)
565. M.J. Gillan: J. Phys. C **18**, 4885 (1985)
566. R.J. Baxter: *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics* (Academic London 1982)
567. L. Tonks: Phys. Rev. **50**, 955 (1936)
568. R.M. De Leonardis, S.E. Trullinger: Phys. Rev. B **22**, 4558 (1980)
569. J.A. Holyst, A. Sukiennicki, 1984, Phys. Rev. B **30**, 5356 (1984)
570. C.R. Willis, M. El-Batanouny, R. Boesch, P. Sodano: Phys. Rev. B **40**, 686(1989)
571. R.M. De Leonardis, S.E. Trullinger: Phys. Rev. B **27**, 1867(1983)
572. M. Croitoru: J. Phys. A: Math. Gen. **20**, 1695 (1987)
573. J.R. Kenné, P. Wofo, T.C. Kofané: J. Phys.: Cond. Matter **6**, 4277 (1994)
574. C.W. Gardiner: *Handbook of Stochastic Methods for Physics, Chemistry and the Natural Sciences* (Springer-Verlag Berlin 1985)
575. H.C. Brinkman: Physica **22**, 29 (1956)
576. E.G. d'Agliano, W.L. Schaich, P. Kumar, H. Suhl: In: *Nobel Symposium 24. Collective Properties of Physical Systems*, ed by B. Lundquist (Academic New York 1973)
577. E.G. d'Agliano, P. Kumar, W. Schaich, H. Suhl: Phys. Rev. B **11**, 2122(1975)
578. R. Zwanzig, In: *Lectures in Theoretical Physics*, Vol. 3, ed by W.E. Brittin, B.W. Downs, J. Downs (Interscience, New York 1961)
579. R. Zwanzig: Phys. Rev. **124**, 983 (1961)
580. H. Mori: Prog. Theor. Phys. **33**, 423 (1965)
581. H. Mori, H. Fugisaka: Prog. Theor. Phys. **49**, 764(1973)
582. D. Forster: *Hydrodynamic Fluctuations, Broken Symmetry and Correlation Functions* (W.A. Benjamin London 1975)
583. R. Kubo: J. Phys. Soc. Jpn. **12**, 570 (1957)
584. R. Kubo: Rep. Prog. Phys. **29**, 255 (1966)
585. R.L. Stratonovich: *Topics in the Theory of Random Noise* (Gordon and Breach, New York 1967)
586. Yu.M. Ivanchenko, L.A. Zil'berman: Pis'ma JETP **8**, 189 (1968) [JETP Lett. **8**, 113 (1968)].
587. Yu.M. Ivanchenko, L.A. Zil'berman: Sov. Phys. JETP **28**, 1272 (1969)
588. V. Ambegaokar, B.I. Halperin: Phys. Rev. Lett. **22**, 1364 (1969)
589. V. Ambegaokar, B.I. Halperin: Phys. Rev. Lett. **23**, 274 (1969)
590. H. Risken, H.D. Vollmer: Phys. Lett. A **69**, 387 (1979)
591. H. Risken, H.D. Vollmer: Z. Phys. B **35**, 177(1979)
592. G. Wilemski: J. Stat. Phys. **14**, 153 (1976)
593. U.M. Titulaer: Physica A **91**, 321 (1978)
594. H. Risken, H.D. Vollmer, M. Mörsch: Z. Phys. B **40**, 343 (1981)
595. H. Risken: *The Fokker-Planck Equation* (Springer Berlin 1984).
596. V.O. Mel'nikov: Phys. Rep. **209**, 1 (1991)
597. P. Fulde, L. Pietronero, W.R. Schneider, S. Strässler: Phys. Rev. Lett. **35**, 1776.
598. W. Dieterich, I. Peschel, W.R. Schneider: Z. Phys. B **27**, 177 (1977)
599. W. Dieterich, T. Geisel, I. Peschel: Z. Phys. B **29**, 5 (1978)
600. H. Risken, H.D. Vollmer: Z. Phys. B **31**, 209(1978)
601. H. Risken, H.D. Vollmer: Z. Phys. B **33**, 297 (1979)
602. H.D. Vollmer, H. Risken: Z. Phys. B **34**, 313 (1979)
603. H.A. Kramers: Physica **7**, 284 (1940)
604. P. Hänggi, P. Talkner, M. Borkovec: Rev. Mod. Phys. **62**, 251(1990)
605. V.P. Zhdanov: Surface Sci. **214**, 289 (1989)
606. H. Mori: Prog. Theor. Phys. **34**, 399 (1965)

607. W.R. Schneider: Z. Phys. B **24**, 135 (1976)
608. T. Geisel: Phys. Rev. B **20**, 4294 (1979)
609. T. Munakata, A. Tsurui: Z. Phys. B **34**, 203(1979)
610. H. Haken: *Synergetics* (Springer-Verlag Berlin 1980)
611. E. Joergensen, V.P. Koshelets, R. Monaco, J. Mygind, M.R. Samuelsen: Phys. Rev. Lett. **49**, 1093 (1982)
612. F. Marchesoni: Phys. Lett. A **115**, 29 (1986)
613. M. Remoissenet: Solid State Commun. **27**, 681(1978)
614. M. Büttiker, R. Landauer: J. Phys. C **13**, L325(1980)
615. N.R. Quintero, A. Sánchez, F.G. Mertens: Phys. Rev. Lett. **84**, 871 (2000)
616. N.R. Quintero, A. Sánchez, F.G. Mertens: Phys. Rev. E **60**, 222 (1999)
617. F. Marchesoni: Phys. Rev. Lett. **74**, 2973(1995)
618. F. Petruccione, P. Biller: Phys. Rev. B **41**, 2145(1990)
619. M. Ogata, Y. Wada: J. Phys. Soc. Jpn. **54**, 3425(1985)
620. M. Ogata, Y. Wada: J. Phys. Soc. Jpn. **55**, 1252(1986)
621. C. Kunz: Phys. Rev. A **34**, 510 (1986)
622. C. Kunz: Phys. Rev. B **34**, 8144 (1986)
623. F. Marchesoni, C.R. Willis: Phys. Rev. A **36**, 4559(1987)
624. N. Theodorakopoulos, E.W. Weller: Phys. Rev. B **38**, 2749(1988)
625. V.G. Bar'yakhtar, B.A. Ivanov, A.L. Sukstanskii, E.V. Tartakovskaya: Teor. Mat. Fiz. **74**, 46 (1988)
626. S.M. Alamoudi, D. Boyanovsky, F.I. Takakura: Phys. Rev. E **57**, 919(1998)
627. Y. Wada, J.R. Schrieffer: Phys. Rev. B **18**, 3897(1978)
628. N. Theodorakopoulos, R. Klein: phys. stat. sol. (a) **61**, 107(1980)
629. N. Theodorakopoulos, R. Klein, In: *Physics in One Dimension*, ed by J. Bernasconi, T. Schneider (Springer-Verlag Berlin 1981)
630. K. Fesser: Z. Phys. B **39**, 47 (1980)
631. Y. Wada, H. Ishiuchi: J. Phys. Soc. Jpn. **51**, 1372(1982)
632. K. Sasaki, K. Maki: Phys. Rev. B **35**, 257(1987)
633. K. Sasaki, K. Maki: Phys. Rev. B **35**, 263(1987)
634. N. Theodorakopoulos: Z. Phys. **33**, 385 (1979)
635. B.A. Ivanov, A.K. Kolezhuk: Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. **49**, 489(1989) [JETP Lett. **49**, 489 (1989)]
636. B.A. Ivanov, A.K. Kolezhuk: Phys. Lett. A **146**, 190(1990)
637. F. Marchesoni, C.R. Willis: Europhys. Lett. **12**, 491(1990)
638. L. Pietronero, S. Strässler: Solid State Commun. **27**, 1041 (1978)
639. C. Kunz, J.A. Combs: Phys. Rev. B **31**, 527(1985)
640. C. Cattuto, G. Costantini, T. Guidi, F. Marchesoni: Phys. Rev. B **63**, 94308(2001)
641. J.A. Combs, S. Yip: Phys. Rev. B **29**, 438(1984)
642. R.W. Holloway, M.J. Gillan: Solid State Commun. **52**, 705(1984)
643. T. Schneider, E. Stoll: Phys. Rev. B **23**, 4631(1981)
644. W.C. Kerr, D. Baeriswyl, A.R. Bishop: Phys. Rev. B **24**, 6566(1981)
645. S. Aubry: J. Chem. Phys. **64**, 3392 (1976)
646. W. Hasenfratz, R. Klein, N. Theodorakopoulos: Solid State Commun. **18**, 893(1976)
647. K. Kawasaki: Prog. Theor. Phys. **55**, 2029 (1976)
648. G.F. Mazenko, P.S. Sahni: Phys. Rev. B **18**, 6139(1978)
649. P.S. Sahni, G.F. Mazenko: Phys. Rev. B **20**, 4674(1979)
650. A.R. Bishop: Solid State Commun. **30**, 37 (1979)
651. A.R. Bishop: J. Phys. A **14**, 1417 (1981)
652. K.M. Leung, D.L. Huber: Solid State Commun. **32**, 127(1979)
653. E. Allroth, H.J. Mikeska: J. Phys. C **13**, L725(1980)
654. E. Allroth, H.J. Mikeska: Z. Phys. B **43**, 209 (1981)
655. J.P. Boucher, F. Mezei, L.P. Regnault, J.P. Renard: Phys. Rev. Lett. **55**, 1778(1985)
656. J.P. Boucher, L.P. Regnault, R. Pynn, J. Bouillot, J.P. Renard: Europhys. Lett. **1**, 415(1986)
657. K. Maki: J. Low Temp. Phys. **41**, 327 (1980)
658. H.J. Mikeska: J. Phys. C **13**, 2913 (1980)
659. W. Dieterich, I. Peschel: Physica A **95**, 208(1979)
660. E.H. Lieb, D.C. Mattis: *Mathematical Physics in One Dimension* (Academic New York 1966)
661. B.J. Ackerson: J. Chem. Phys. **69**, 684 (1978)
662. A.Z. Akcasu, J.J. Duderstadt: Phys. Rev. **188**, 479(1969)
663. D. Forster, P.C. Martin: Phys. Rev. A **2**, 1575 (1970)
664. G.F. Mazenko: Phys. Rev. A **3**, 2121 (1971)
665. C.D. Boley: Phys. Rev. A **5**, 986 (1972)
666. A.Z. Akcasu: Phys. Rev. A **7**, 182 (1973)
667. J. Bosse, W. Götze, M. Lücke: Phys. Rev. A **17**, 434(1978)
668. Y. Imry, B. Gavish: J. Chem. Phys. **61**, 1554(1974)
669. S. Alexander, P. Pincus: Phys. Rev. B **18**, 2011(1978)
670. A.R. Bishop, W. Dieterich, I. Peschel: Z. Phys. B **33**, 187(1979)

671. S.E. Trullinger, M.D. Miller, R.A. Guyer, A.R. Bishop, F. Palmer, J.A. Krumhansl: Phys. Rev. Lett. **40**, 206 (1978)
672. S.E. Trullinger, M.D. Miller, R.A. Guyer, A.R. Bishop, F. Palmer, J.A. Krumhansl: Phys. Rev. Lett. **40**, 1603 (1978)
673. T. Schneider, E.P. Stoll, R. Morf: Phys. Rev. B **18**, 1417(1978)
674. K.C. Lee, S.E. Trullinger: Phys. Rev. B **21**, 589 (1980)
675. H.D. Vollmer: Z. Phys. B **33**, 103 (1979)
676. M. Büttiker, R. Landauer: Phys. Rev. A **23**, 1397(1981)
677. M. Büttiker, R. Landauer: Phys. Rev. Lett. **43**, 1453(1979)
678. M. Büttiker, T. Christen: Phys. Rev. Lett. **75**, 1895(1995)
679. G.H. Vineyard: J. Phys. Chem. Solids **3**, 121(1957)
680. R. Landauer, J.A. Swanson: Phys. Rev. **121**, 1668(1961)
681. J.S. Langer: Ann. Phys. **41**, 108 (1967)
682. J.S. Langer: Phys. Rev. Lett. **21**, 973 (1968)
683. J.S. Langer: Ann. Phys. **54**, 258 (1969)
684. L. Gunther, Y. Imry: Phys. Rev. Lett. **44**, 1225 (1980)
685. O.M. Braun, Yu.S. Kivshar: Phys. Rev. B **50**, 13388 (1994)
686. P. Wofo, T.C. Kofane, A.S. Bokosah: Phys. Scripta **56**, 655(1997)
687. A.R. Bishop, S.E. Trullinger: Phys. Rev. B **17**, 2175 (1978)
688. P. Reimann, C. van der Broeck, H. Linke, P. Hänggi, J.M. Rubi, A. Pérez-Madrid: Phys. Rev. Lett. **87**, 10602 (2001)
689. H.D. Vollmer, H. Risken: Z. Phys. B **52**, 259 (1983)
690. D.E. McCumber: J. Appl. Phys. **39**, 3113 (1968)
691. E. Ben Jacob, D.J. Bergman, B.J. Matkowsky, Z. Schuss: Phys. Rev. A **26**, 2805 (1982)
692. M. Büttiker, E.P. Harris, R. Landauer: Phys. Rev. B **28**, 1268 (1983)
693. H.D. Vollmer, H. Risken: Z. Phys. B **37**, 343 (1980)
694. K. Voigtlaender, H. Risken: J. Stat. Phys. **40**, 397 (1985)
695. H. Risken, K. Voigtlaender: J. Stat. Phys. **41**, 825 (1985)
696. G. Costantini, F. Marchesoni: Europhys. Lett. **48**, 491 (1999)
697. A.A. Middleton: PhD. Thesis (Princeton University 1990)
698. A.A. Middleton, D.S. Fisher: Phys. Rev. Lett. **66**, 92 (1991)
699. A.A. Middleton, Phys. Rev. Lett. **68**, 670 (1992)
700. A.A. Middleton, D.S. Fisher: Phys. Rev. Lett. **47**, 3530 (1993)
701. L. Sneddon: Phys. Rev. Lett. **52**, 65 (1984)
702. S.N. Coppersmith, D.S. Fisher: Phys. Rev. A **38**, 6338 (1988)
703. A. Carpio, L.L. Bonilla: Phys. Rev. Lett. **86**, 6034 (2001)
704. Z. Zheng, G. Hu, B. Hu, Phys. Rev. Lett. **86**, 2273 (2001)
705. T. Munakata: Phys. Rev. A **45**, 1230 (1992)
706. F. Marchesoni: Phys. Rev. Lett. **73**, 2394 (1994)
707. A.V. Savin, G.P. Tsironis, A.V. Zolotaryuk: Phys. Lett. A **229**, 279 (1997)
708. A.V. Savin, G.P. Tsironis, A.V. Zolotaryuk: Phys. Rev. E **56**, 2457 (1997)
709. G. Costantini, F. Marchesoni: Phys. Rev. Lett. **87**, 114102 (2001)
710. A.V. Ustinov, M. Cirillo, B.A. Malomed: Phys. Rev. B **47**, 8357 (1993)
711. O.M. Braun, B. Hu, A. Zeltser: Phys. Rev. E **62**, 4235 (2000)
712. T. Strunz, F.-J. Elmer: Phys. Rev. E **58**, 1601, 1612.
713. J.-A. Sepulchre, R.S. MacKay: Physica D **113**, 342 (1998)
714. F. Marchesoni, M. Borromeo: Phys. Rev. B **65**, 184101 (2002)
715. A.R. Bishop, D.K. Campbell, P.S. Lomdahl, B. Horovitz, S.R. Phillpot: Synthetic Metals **9**, 223 (1984)
716. A.V. Ustinov, B.A. Malomed, S. Sakai: Phys. Rev. B **57**, 11691 (1998)
717. O.M. Braun, B. Hu, A. Filippov, A. Zeltser: Phys. Rev. E **58**, 1311 (1998)
718. O.M. Braun: Phys. Rev. E **62**, 7315 (2000)
719. O.M. Braun, Hong Zhang, Bambi Hu, and J. Tekic: Phys. Rev. E **67**, 066602 (2003)
720. O.M. Braun, T. Dauxois, M.V. Paliy, M. Peyrard, B. Hu: Physica D **123**, 357 (1998)
721. M. Paliy, M., O. Braun, T. Dauxois, B. Hu: Phys. Rev. E **56**, 4025 (1997)
722. H.G.E. Hentschel, F. Family, Y. Braiman: Phys. Rev. Lett. **83**, 104 (1999)
723. G.H. Hardy, E.M. Wright: *Introduction to the Theory of Numbers* (Oxford University Press Oxford 1979)
724. J.C. Ariyasu, A.R. Bishop: Phys. Rev. B **35**, 3207 (1987)
725. O.M. Braun, B. Hu: J. Stat. Phys. **92**, 629 (1998)
726. M.J. Renné, D. Polder: Rev. Phys. Appl. **9**, 25 (1974)
727. J.R. Waldram, P.H. Wu: J. Low Temp. Phys. **47**, 363 (1982)
728. M. Inui, S. Doniach: Phys. Rev. B **35**, 6244(1987)
729. F. Falo, L.M. Floría, P.J. Martínez, J.J. Mazo: Phys. Rev. B **48**, 7434(1993)
730. L.M. Floría, F. Falo: Phys. Rev. Lett. **68**, 2713 (1992)
731. N.R. Quintero, A. Sánchez: Phys. Lett. A **247**, 161(1998)
732. N.R. Quintero, A. Sánchez: Eur. Phys. J. B **6**, 133 (1998)
733. O.H. Olsen, M.R. Samuelsen: Phys. Rev. B **28**, 210 (1983)
734. N.R. Quintero, A. Sánchez, F.G. Mertens: Phys. Rev. E **62**, 5695 (2000)
735. P.J. Martinez, P. J., F. Falo, J.J. Mazo, L.M. Floria, A. Sánchez: Phys. Rev. B **56**, 87 (1997)

736. M.V. Fistul, E. Goldobin, A.V. Ustinov: Phys. Rev. B **64**, 92501 (2001)
737. P.S. Lomdahl, M.R. Samuelsen: Phys. Rev. A **34**, 664 (1986)
738. P.S. Lomdahl, M.R. Samuelsen: Phys. Lett. A **128**, 427 (1988)
739. N. Grønbech-Jensen, Yu.S. Kivshar, M.R. Samuelsen: Phys. Rev. B **43**, 5698 (1991)
740. Z. Zheng, M.C. Cross, G. Hu, Phys. Rev. Lett. **89**, 154102 (2002)
741. S. Flach, O. Yevtushenko, Y. Zolotaryuk: Phys. Rev. Lett. **84**, 2358 (2000)
742. P. Reimann: Phys. Rev. Lett. **86**, 4992 (2001)
743. O. Yevtushenko, S. Flach, Y. Zolotaryuk, A.A. Ovchinnikov: Europhys. Lett. **54**, 141 (2001)
744. S. Denisov, S. Flach, A.A. Ovchinnikov, O. Yevtushenko, Y. Zolotaryuk: Phys. Rev. E **66**, 041104 (2002)
745. P. Reimann: Phys. Rep. **361**, 57 (2002)
746. P. Reimann, R. Bartussek, R. Häussler, P. Hänggi: Phys. Lett. A **215**, 26 (1996)
747. L.M. Floría, F. Falo, P.J. Martínez, J.J. Mazo: *Collective non-thermal ratchet* (2002)
748. T. Bena, M. Copelli, C. Van den Broeck: J. Stat. Phys. **101**, 415 (2000)
749. M. Porto, M. Urbakh, J. Klafter, Phys. Rev. Lett. **85**, 491 (2000)
750. P. Jung, J.G. Kissner, P. Hänggi: Phys. Rev. Lett. **76**, 3436 (1996)
751. M. Borromeo, G. Costantini, F. Marchesoni: Phys. Rev. E **65**, 041110 (2002)
752. H. Schanz, M.-F. Otto, R. Ketzmerick, T. Dittrich: Phys. Rev. Lett. **87**, 70601 (2001)
753. S. Denisov, S. Flach: Phys. Rev. E **64**, 056236 (2001)
754. S. Denisov, J. Klafter, M. Urbakh, S. Flach: Physica D **170**, 131 (2002)
755. F. Marchesoni: Phys. Rev. Lett. **77**, 2364 (1996)
756. S. Flach, Y. Zolotaryuk, A.E. Miroshnichenko, M.V. Fistul: Phys. Rev. Lett. **88**, 184101 (2002)
757. M. Salerno, Y. Zolotaryuk: Phys. Rev. E **65**, 056603 (2002)
758. G. Costantini, F. Marchesoni, M. Borromeo: Phys. Rev. E **65**, 051103 (2002)
759. M. Salerno, N.R. Quintero: Phys. Rev. E **65**, 025602 (2002)
760. E. Goldobin, A. Sterck, D. Koelle: Phys. Rev. E **63**, 031111 (2001)
761. G. Carapella: Phys. Rev. B **63**, 054515 (2001)
762. G. Carapella, G. Costabile: Phys. Rev. Lett. **87**, 77002 (2001)
763. G. Carapella, G. Costabile, R. Latempa, N. Martucciello, M. Cirillo, A. Polcari, F. Filatrella, cond-mat/0112467 (2001)
764. F. Falo, P.J. Martinez, J.J. Mazo, S. Cilla: Europhys. Lett. **45**, 700 (1999)
765. E. Trias, J.J. Mazo, F. Falo, T.P. Orlando: Phys. Rev. E **61**, 2257 (2000)
766. C.-S. Lee, B. Janko, I. Derenyi, A.-L. Barabasi: Nature **400**, 337 (1999)
767. A. Vanossi, A. Franchini, V. Bortolani: Surf. Sci. **502-503**, 437 (2002)
768. J.A. Snyman, J.H. van der Merve: Surface Sci. **42**, 190(1974)
769. J.A. Snyman, J.H. van der Merwe: Surface Sci. **45**, 619(1974)
770. S. Stoyanov, H. Müller-Krumbhaar: Surface Sci. **159**, 49(1985)
771. K.M. Martini, S. Burdick, M. El-Batanouny, G. Kirczenow: Phys. Rev. B **30**, 492(1984)
772. I. Markov, V. Karaivanov: Thin Solid Films **61**, 115(1979)
773. I. Markov, V. Karaivanov: Thin Solid Films **65**, 361(1980)
774. Y. Braiman, J. Baumgarten, J. Jortner, J. Klafter: Phys. Rev. Lett. **65**, 2398(1990)
775. Y. Braiman, J. Baumgarten, J. Klafter: Phys. Rev. B **47**, 11159 (1993)
776. A.M. Kosevich, A.S. Kovalev: *Introduction to Nonlinear Physical Mechanics* (Naukova Dumka Kiev 1989)
777. A.S. Kovalev: Fiz. Tverd. Tela **21**, 1729 (1979)
778. A. Paweek, M. Jaworski, J. Zagrodzinski: J. Phys. A: Math. Gen. **21**, 2727 (1988)
779. S. Stoyanov, in: *Growth and Properties of Metal Clusters*, ed by J. Bourdon (Elsevier Amsterdam 1980)
780. Y. Braiman, F. Family, H.G.E. Hentschel: Phys. Rev. E **53**, R3005(1996)
781. A. Kwaśniewski, P. Machnikowski, P. Magnuszewski: Phys. Rev. E **59**, 2347(1999)
782. L.D. Landau: Zh. Eksp. Teor. Fiz. **7**, 627 (1937) [Phys. Z. Sowjetunion **11**, 26 (1937)]
783. N. Mermin, H. Wagner: Phys. Rev. Lett. **17**, 1133(1966); Erratum: Phys. Rev. Lett. **17**, 1307 (1966)
784. P.C. Hohenberg: Phys. Rev. **158**, 383 (1967)
785. B. Jancovici: Phys. Rev. Lett. **19**, 20 (1967)
786. N.D. Mermin: Phys. Rev. **176**, 250 (1968)
787. V.L. Berezinsky: Zh. Eksp. Teor. Fiz. **59**, 907 (1970)
788. V.L. Berezinsky: Zh. Eksp. Teor. Fiz. **61**, 1144 (1971)
789. J.M. Kosterlitz, D.J. Thouless: J. Phys. C **6**, 1181 (1973)
790. J.M. Kosterlitz: J. Phys. C **7**, 1046 (1974)
791. A.P. Young: Phys. Rev. B **19**, 1855 (1979)
792. B.I. Halperin, D.R. Nelson: Phys. Rev. B **19**, 2457(1979)
793. V.M. Bedanov, G.V. Gadiyak, Yu.E. Lozovik: Zh. Eksp. Teor. Fiz. **88**, 1622 (1985)
794. Y. Imry, S.K. Ma: Phys. Rev. Lett. **35**, 1399 (1975)
795. I.F. Lyuksyutov, M.V. Feigelman: Zh. Eksp. Teor. Fiz. **86**, 774 (1984)
796. W. Selke, K. Binder, W. Kinzel: Surface Sci. **125**, 74 (1983)
797. W. Selke: Phys. Rep. **170**, 213 (1988)
798. Yu.M. Malozovsky, V.M. Rozenbaum: Physica A **175**, 127 (1991)
799. V.M. Rozenbaum, V. M., V.M. Ogenko, A.A. Chuiko: Usp. Fiz. Nauk **161**, 79 (1991)
800. O.M. Braun, Yu.S. Kivshar: Phys. Rev. B **44**, 7694 (1991)

801. P.L. Christiansen, A.V. Savin, A.V. Zolotaryuk: Phys. Rev. E **57**, 13564 (1998)
802. A.V. Savin, J.M. Khalack, P.L. Christiansen, A.V. Zolotaryuk: Phys. Rev. B **65**, 054106 (2002)
803. F. Yoshida, Y. Okwamoto, T. Nakayama: J. Phys. Soc. Jpn. **50**, 1039 (1981)
804. F. Yoshida, Y. Okwamoto, T. Nakayama: J. Phys. Soc. Jpn. **51**, 1329 (1982)
805. H. Kato, H. Y. Okwamoto, T. Nakayama: J. Phys. Soc. Jpn. **52**, 3334 (1983)
806. A. Luther, V.L. Pokrovsky, J. Timonen, In: *Phase Transition in Surface Films* (Plenum New York 1980) p. 506.
807. V.L. Pokrovsky, A.L. Talapov: Zh. Eksp. Teor. Fiz. **78**, 269 (1980)
808. Y. Okwamoto: J. Phys. Soc. Jpn. **49**, 8 (1980)
809. T. Natterman: J. Phys.(France) **41**, 1251 (1980)
810. H.J. Schulz: Phys. Rev. B **22**, 5274 (1980)
811. J.V. Jose, L.P. Kadanoff, S. Kirkpatrick: Phys. Rev. B **16**, 1217 (1977)
812. P.B. Wiegman: J. Phys. C **11**, 1583 (1978)
813. I.F. Lyuksyutov: Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. **32**, 593 (1980)
814. S.N. Coppersmith, D.S. Fisher, B.I. Halperin, P.A. Lee, W.F. Brinkman: Phys. Rev. Lett. **46**, 549 (1981)
815. E.B. Kolomeisky, T. Curcic, J.P. Straley: Phys. Rev. Lett. **75**, 1775 (1995)
816. I.F. Lyuksyutov, V.L. Pokrovsky: Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. **33**, 343 (1981)
817. O.M. Braun, M. Peyrard: Phys. Rev. E **51**, 4999 (1995)
818. O.M. Braun, O.A. Chubykalo, T.P. Valkering: Phys. Rev. B **53**, 13877 (1996)
819. O.M. Braun, O.A. Chubykalo, Yu.S. Kivshar, L.Vázquez: Phys. Rev. B **48**, 3734 (1993)
820. O.M. Braun, M. Peyrard: Phys. Rev. B **51**, 17158 (1995)
821. V.K. Medvedev, A.G. Naumovets, T.P. Smereka: Surface Sci. **34**, 368(1973)
822. M.S. Gupalo, V.K. Medvedev, B.M. Palyukh, T.P. Smereka: Sov. Phys. Solid State **21**, 568 (1979)
823. O.M. Braun, T. Dauxois, M. Peyrard: Phys. Rev. B **54**, 313 (1996)
824. J.E. Black, Z.-J. Tian: Phys. Rev. Lett. **71**, 2445 (1993)
825. R.G. Caflisch, A.N. Berker, M. Kardar: Phys. Rev. B **31**, 4527 (1985)
826. K. Kern, G. Comsa, In: *Kinetics of Ordering and Growth at Surfaces*, ed by M.G. Lagally (Plenum Press New York 1990)
827. J.P. Hirth, J. Lothe: *Theory of Dislocations* (John Wiley New York 1982)
828. J.A. Snyman, H.C. Snyman: Surface Sci. **105**, 357(1981)
829. J.H. van der Merwe: J. Appl. Phys. **41**, 4725 (1970)
830. F.F. Abraham, W.E. Rudge, D. Auerbach, S.W. Koch: Phys. Rev. Lett. **52**, 445 (1984)
831. P. Bak, D. Mukamel, J. Villain: Phys. Rev. B **19**, 1610 (1979)
832. V.L. Pokrovsky, A.L. Talapov: Phys. Rev. Lett. **42**, 65 (1979)
833. F.S. Rys: Phys. Rev. Lett. **51**, 849 (1983)
834. A. Novaco, J.P. McTague: Phys. Rev. Lett. **38**, 1286 (1976)
835. G.V. Uimin, L.N. Tschur: Pis'ma JETP **28**, 20 (1978)
836. S.E. Burkov: Pis'ma JETP **29**, 457 (1979)
837. W. Uhler, R. Schilling: Phys. Rev. B **37**, 5787 (1988)
838. J.E. Black, D.L. Mills: Phys. Rev. B **42**, 5610(1990)
839. P.S. Lomdahl, D.J. Srolovitz: Phys. Rev. Lett. **57**, 2702 (1986)
840. D.J. Srolovitz, P.S. Lomdahl: Physica D **23**, 402(1986)
841. Yu.N. Gornostyrev, M.I. Katsnelson, A.V. Kravtsov, A.V. Trefilov: Phys. Rev. B **60**, 1013 (1999)
842. O.M. Braun, M.V. Paliy, J. Röder, A.R. Bishop: Phys. Rev. E **63**, 036129 (2001)
843. O.M. Braun, M. Paliy, B. Hu: Phys. Rev. Lett. **83**, 5206 (1999)
844. R. Besseling, R. Niggebrugge, P.H. Kes: Phys. Rev. Lett. **82**, 3144 (1999)
845. C. Reichhardt, F. Nori: Phys. Rev. Lett. **82**, 414 (1999)
846. T.S. van Erp, A. Fasolino, O. Radulescu, T. Janssen: Phys. Rev. B **60**, 6522 (1999)
847. A. Vanossi, J. Röder, A.R. Bishop, V. Bortolani: Phys. Rev. Lett. **63**, 017203 (2000)
848. L. Trallori: Phys. Rev. B **57**, 5923 (1998)
849. S.E. Korshunov: Phys. Rev. Lett. **88**, 167007 (2002)
850. O. Tchernyshyov, L.P. Pryadko: Phys. Rev. B **61**, 12503 (2000)
851. M. Bosch, W. van Saarloos, J. Zaanen: Phys. Rev. B **63**, 092501(2001)
852. M. Porto, M. Urbakh, J. Klafter: Phys. Rev. Lett. **85**, 6058 (2000)
853. U. Dehlinger, A. Kochendörfer: Z. Physik **116**, 576 (1940)
854. A. Seeger, H. Engelke, Theory of kink mobilities at low temperatures, in: *Dislocation Dynamics* eds A.R. Rosenfield, G.T. Hahn, S.L. Bement, Jr., R.I. Jaffe (McGraw-Hill New York 1969) pp. 623-650
855. G.I. Taylor: Proc. Roy. Soc. London A **145**, 362 (1934)
856. M. Polanyi: Z. Physik **89**, 660 (1934)
857. E. Orowan: Z. Physik **89**, 634 (1934)
858. A. Seeger: Z. Naturforschg **8a**, 246 (1953)
859. W. Blaschke, *Vorlesungen über Differential-Geometrie* Vol. I, Elementare Differentialgeometrie, 4-th ed. (Springer Berlin 1945)
860. L. Bianchi: *Lezioni di Geometria Differenziale*, 3rd ed (Spoerri Pisa 1920)
861. L. Bianchi: *Vorlesungen über Differentialgeometrie*, 2nd ed. (Teubner. Leipzig 1912)
862. L.P. Eisenhart: *A Treatise on the Differential Geometry of Curves and Surfaces* (Ginn Boston 1909)
863. L. Bianchi: Annali Scuola Norm. Sup. Pisa (1), **2**, 285 (1879)

864. L. Bianchi: Rend. Acc. Naz. Lincei (5) **8**, 484 (1899)
865. M. Heyerhoff: *Die frühe Geschichte der SolitONENTHEORIE*, Dr. rer. nat. thesis (Universität Greifswald Greifswald 1997)
866. M. Heyerhoff, in: *Mathematikgeschichte und Unterricht I. Mathematik in Wandel*, ed by M. Tiepell (Franzbecker Hildesheim-Berlin 1998), pp. 295-305
867. E. Bour: Journal de l'École Imperiale Polytechnique **19**, cahier 39 (1862) pp. 1-148
868. A. Seeger: Theorie der Gitterfehlstellen, in: *Encyclopedia of Physics*, Vol. VII/1. ed by S. Flügge (Springer Berlin 1955)
869. A. Seeger: Kristallplastizität, in: *Encyclopedia of Physics*, Vol. VII/2. ed by S. Flügge (Springer Berlin 1958)
870. P.G. Bordoni: J. Acoust. Soc. Amer. **26**, 495 (1954)
871. A. Seeger, P. Schiller, Kinks and dislocation lines and their effects on the internal friction in crystals, in: *Physical Acoustics* Vol. III A. ed by W.P. Mason (Academic Press New York and London 1966), pp. 361-495
872. J.D. Eshelby: Proc. Roy. Soc. London A **266**, 222 (1962)
873. A. Seeger, Structure and diffusion of kinks in monoatomic crystals, in: *Dislocations 1984*, eds P. Veyssiére, L. Kubin, J. Castaing (CNRS Paris 1984) pp. 141-177
874. A. Seeger, Solitons and statistical mechanics, in: *Trends in Applications of Pure Mathematics to Mechanics* (Lecture Notes in Physics 249) eds E. Kröner, K. Kichgässner (Springer Berlin 1986) pp. 114-155
875. A. Seeger: Z. Metallkunde **93**, 760 (1992)
876. A. Seeger: Mater. Sci. Eng. A (in press)

