

УДК 519.688

А.С. МАЗМАНИШВИЛИ

Национальный Научный Центр "ХФТИ" НАНУ

Д.В. ЛАПТЕВ

Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина НАНУ

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ДИНАМИКИ ДИССИПАТИВНЫХ КВАЗИБРИЗЕРОВ
В ОБОБЩЁННОЙ МОДЕЛИ ОДНОМЕРНОЙ РЕШЁТКИ ХИРОТЫ**

Сильно возбужденные состояния в низкоразмерных кристаллах могут быть описаны в рамках теории солитонов, которым сопоставляются точные решения уравнений в частных производных. В то же время число интегрируемых нелинейных решеток крайне мало. Более 40 лет назад Р. Хиротой для самодуальных уравнений сети были найдены точные многосолитонные решения. Им также было показано, что эти нелинейные уравнения эквивалентны уравнениям колебаний одномерного кристалла, в котором сила взаимодействия между соседними атомами пропорциональна тангенсу разности их смещений. Для такой нелинейной решетки Хироты М.М. Богданом были получены точные решения для дискретных бризеров, представляющих собой связанные состояния солитон-антисолитонной пары, и рассчитаны физически важные интегралы движения – импульс, энергия и поток энергии солитонов. В данной работе численно моделируется динамика нелинейных локализованных колебаний – дискретных бризеров и квазибризеров одноатомной и двухатомной ангармонической цепочки. Основываясь на методе Рунге-Кутты 4-го порядка, разработан алгоритм решения уравнения обобщенной решетки Хироты. Показана устойчивость дискретных квазибризеров в обобщенной решетке Хироты при малых диссипациях. При этом происходят незначительные изменения со временем формы и физических характеристик, таких как амплитуда, частота и скорость огибающей квазибризера. Характерные времена таких изменений намного больше периода осциллирующей квазибризера. При больших коэффициентах диссипации наблюдается излучение квазибризером линейных волн и резкое его затухание. Для системы двухатомной цепочки Хироты, состоящей из чередующихся легких и тяжелых атомов, получен дискретный квазибризер, который представляет собой колеблющийся легкий атом, находящийся между двумя тяжелыми атомами, и совершающий колебания с примерно постоянной амплитудой и частотой. Массивные атомы при этом практически неподвижны. Частота колеблющегося легкого атома лежит выше оптической ветви фононных колебаний двухатомной цепочки.

Ключевые слова: уравнение решетки Хироты, атомная цепочка, дискретные бризеры, квазибризеры.

О.С. МАЗМАНИШВИЛИ

Национальный Научный Центр "ХФТИ" НАНУ

Д.В. ЛАПТЕВ

Фізико-технічний інститут низьких температур ім. Б.І. Веркіна НАНУ

**МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ДИНАМІКИ ДИСПАТИВНИХ КВАЗІБРИЗЕРІВ
В УЗАГАЛЬНЕНІЙ МОДЕЛІ ОДНОВИМІРНОЇ РЕШІТКИ ХІРОТИ**

Сильно возбужденные станы в низковимірних кристалах можуть бути описані в рамках теорії солітонів, яким зіставляються точні розв'язки рівнянь в частинних похідних. У той же час кількість інтегрованих нелінійних решіток вкрай мала. Понад 40 років тому Р. Хіртою для самодуальних рівнянь мережі були знайдені точні багатосолітонні розв'язки. Ним також було показано, що ці нелінійні рівняння еквівалентні рівнянням коливань одновимірного кристала, в якому сила взаємодії між сусідніми атомами пропорційна тангенсу різниці їх зсувів. Для такої нелінійної решітки Хіроты М.М. Богданом було отримано точні розв'язки для дискретних бризерів, що представляють собою зв'язані стани солітон-антисолітонних пар, і розраховано фізично важливі інтеграли руху – імпульс, енергія і потік енергії солітонів. У даній роботі чисельно моделюється динаміка нелінійних локалізованих коливань – дискретних бризерів і квазібризерів одноатомного і двоатомного ангармонічного ланцюжка атомів. Грунтуючись на методі Рунге-Кутти 4-го порядку, розроблено алгоритм розв'язку рівняння узагальненої решітки Хіроты. Показана стійкість дискретних квазібризерів в узагальненій решітці Хіроты при малої дисипації. При цьому відбуваються незначні зміни з часом форми і фізичних характеристик, таких як амплітуда, частота і швидкість огибающей квазібризера. Характерні часи таких змін набагато більші періоду осциляцій квазібризера. При великих коефіцієнтах дисипації спостерігається випромінювання квазібризером лінійних хвиль і різке його загасання. Для системи двоатомного ланцюжка Хіроты, що складається з чергуючих легких і важких атомів, отриманий дискретний квазибризер, який являє собою легкий атом, що знаходиться між двома важкими атомами, і здійснює коливання з приблизно постійною амплітудою і частотою. Массивні атоми при цьому практично не рухаються. Частота коливань легкого атома лежить вище оптичної гілки фононних коливань двоатомного ланцюжка.

Ключові слова: рівняння решітки Хіроти, атомний ланцюг, дискретні бризери, квазібризери.

A. S. MAZMANISHVILI

National Science Center "Kharkov Institute of Physics & Technology" NASU

D.V. LAPTEV

B. Verkin Institute for Low Temperature Physics and Engineering NASU

MATHEMATICAL MODELING OF THE DYNAMICS OF DISSIPATIVE QUASIBRITHERS IN THE GENERALIZED MODEL OF THE ONE-DIMENSIONAL HIROTA LATTICE

Strongly excited states in low-dimensional crystals can be described within the framework of the theory of solitons, as the exact solutions of integrable partial differential equations. At the same time, the number of integrable nonlinear lattices is extremely small. More than 40 years ago, R. Hirota has found the exact multi-soliton solutions for the system of self-dual network equations. He has also showed that these nonlinear equations are equivalent to the equations of a one-dimensional crystal oscillations, in which the interaction force between neighboring atoms is proportional to the tangent of the difference of their displacements. M.M. Bogdan has obtained the exact discrete breathers solutions for the nonlinear Hirota lattice equation, which are bound states of soliton-antisoliton pairs, and physically important integrals of motion – the momentum, energy, and energy flux of solitons were calculated. The explicit expressions for moving discrete breathers made possible to describe analytically the interaction of these excitations with each other and with other excitations of the system. It is known that in exactly integrable equations solitons in motion retain their individuality and their interaction reduces in the case of kinks and antikinks to additional shifts of the centers of mass, and in the case of breathers also to phase shifts of their oscillations in time. In this paper, the dynamics of nonlinear localized oscillations – discrete breathers and quasibreathers – is modeled numerically for a monatomic and diatomic anharmonic chain of atoms. Based on the fourth-order Runge-Kutta method, an algorithm for solving the Hirota generalized lattice equation is developed. The stability of discrete quasibreathers in the generalized Hirota lattice for small dissipations is shown. During the evolution there are minor changes in form and physical characteristics over time, such as the amplitude, frequency, and speed of the envelope of the quasibreather. The characteristic times for such changes are much larger than the quasibreather period of oscillations. At large dissipation coefficients, a quasibreather emits the linear waves and its damping is abrupt. For a system of a diatomic Hirota chain consisting of alternating light and heavy atoms, a discrete quasibreather is obtained, which is an oscillating light atom located between two heavy atoms, oscillating with approximately constant amplitude and frequency. Massive atoms are practically immobile in this case. The frequency of an oscillating light atom lies above the optical branch of the phonon spectrum of a diatomic chain.

Keywords: Hirota lattice equation, atomic chain, discrete breathers, quasibreathers.

Постановка задачи

В последние годы интенсивно изучаются нелинейные локализованные колебания – дискретные бризеры (или внутренние локализованные моды) в различных физических системах, таких как ангармонические цепочки атомов, оптические и оптоволоконные микрорезонаторы, системы джозефсоновских контактов, оптические и электрические линии передачи и другие [1]. В работах М.М. Богдана получены аналитические решения в виде дискретного бризера (ДБ) [2] для уравнения решётки Хироты [2-4], которые описывают динамику одномерного ангармонического кристалла с тангенциальной силой взаимодействия между ближайшими соседями. В настоящей работе численно исследуется эволюция дискретных квазibriзеров [5] в обобщённой модели одномерной решётки Хироты [2, 4], состоящей из чередующихся атомов с разными массами и учитывающей такой физически важный эффект, как диссипация и внешняя накачка. В отличие от дискретных бризеров, квазibriзеры являются не строго периодическими во времени динамическими объектами, хотя и локализованными в пространстве [5].

Моделирование нелинейной динамики решётки Хироты

Наше рассмотрение начнём с точно решаемого уравнения, описывающего одномерный ангармонический кристалл с тангенциальным взаимодействием между ближайшими соседями, – уравнение решётки Хироты. Данное уравнение в безразмерных переменных имеет следующий вид [2, 3]:

$$\frac{\ddot{\varphi}_n}{1 + \dot{\varphi}_n^2} = \operatorname{tg}(\varphi_{n-1} - \varphi_n) - \operatorname{tg}(\varphi_n - \varphi_{n+1}). \quad (1)$$

Здесь обозначено: $\varphi_n = \varphi_n(t)$ – смещения атомов из положений равновесия. Считаем, что пространственный индекс и временная переменная изменяются в следующих диапазонах: $n=1, 2, \dots, N$, $t=0, \dots, t_{\max}$. Уравнение (1) описывает одномерную цепочку атомов, в которой учитывается взаимодействие только между ближайшими соседями, причём сила взаимодействия пропорциональна тангенсу от разности смещений. В данной модели кинетическая часть имеет нестандартный вид. В пределе малых смеще-

ний и скоростей атомов модель сводится к хорошо изученным моделям Ферми-Паста-Улама и модели одномерного кристалла с линейной силой взаимодействия между ближайшими соседями. В 2003 г. М.М. Богданом [2] было впервые получено точное решение уравнения (1) в виде движущегося дискретного бризера:

$$\varphi_n(t) = \arctg \left[\frac{\operatorname{sh}(\kappa/2) \cos(kn - \omega t + \alpha)}{\sin(k/2) \operatorname{ch} \kappa(n - Vt - n_c)} \right], \quad \omega = 2 \operatorname{ch} \frac{\kappa}{2} \sin \frac{k}{2}, \quad V = \frac{\operatorname{sh}(\kappa/2)}{\kappa/2} \cos \frac{k}{2}, \quad (2)$$

где ω – частота заполнения и V – скорость огибающей дискретного бризера, при этом параметр k играет роль квазиволнового числа, а параметр κ связан с амплитудой и эффективной шириной огибающей бризера, α, n_c – начальная фаза колебаний и начальное положение центра масс бризера – произвольные вещественные константы. Решение (2) определяется двумя независимыми параметрами.

Точные решения уравнения (1) в виде солитон-солитонных, солитон-антисолитонных и бризерных сверхрешёток получены в [4].

Для моделирования рассматриваемых нелинейных цепочек атомов в данной работе был разработан алгоритм численного решения системы из $2N$ дифференциальных уравнений второго порядка, основанный на методе Рунге-Кутты 4-го порядка. В работе везде используются периодические граничные условия:

$$\varphi_0 = \varphi_N, \quad \varphi_{N+1} = \varphi_1. \quad (3)$$

Для проверки метода было рассмотрено уравнение (1) и в качестве начального условия было взято точное решение (2) при $t = 0$.

На рис. 1 снизу приведены трёхмерные графики зависимостей смещений атомов в цепочке от времени и номера узла, а сверху – соответствующие этим случаям начальные условия.

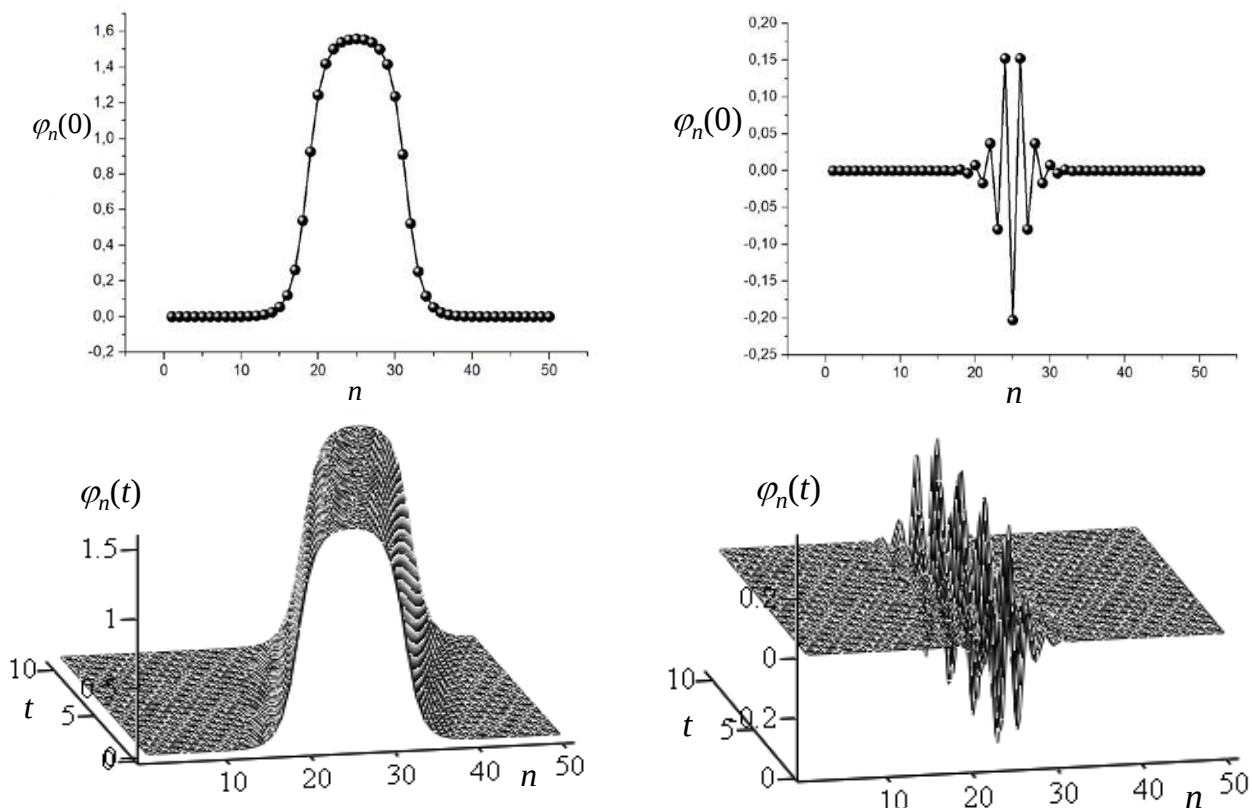


Рис. 1. Динамика ангармонической цепочки.

Параметры: $n_c = 25$, $\kappa = 0.8$; слева: $k = 0.01$, $\alpha = 0$, справа: $k = \pi$, $\alpha = \pi/3$

Были взяты следующие значения параметров: количество атомов $N = 50$, время счёта $t_{\max} = 10$, $\kappa = 0.8$ (близкие к единице значения этого параметра соответствуют сильной локализации бризера), координата центра бризера $n_c = 25$, квазиволновое число и начальная фаза $k = 0.01$, $\alpha = 0$ (слева) и $k = \pi$, $\alpha = \pi/3$ (справа). Для таких бризеров периоды колебаний $T = 2\pi/\omega = \pi \operatorname{sech}(\kappa/2) \operatorname{cosec}(k/2)$ соответственно равны 581.20 и 2.91.

Получившиеся возбуждения представляют собой дискретные бризеры. Слева – локализованный бризер, у которого скорость центра масс намного больше фазовой скорости внутреннего заполнения, справа – локализованный малоамплитудный бризер с нулевой скоростью центра масс. Итак, в течение времени дискретный бризер при различных значениях параметров сохраняет локализацию значения амплитуд и скорости.

Поскольку в данном случае одноатомной цепочки начальное условие является точным решением, оно не должно разрушаться с течением времени, что подтвердило численное моделирование. Таким образом, с помощью точного решения была проверена численная схема. Кроме того, правильность схемы подтверждена неизменностью значений следующих интегралов движения с течением времени:

$$E = \frac{1}{2} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \ln(1 + \dot{\varphi}_n^2) - \frac{1}{2} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \ln[\cos^2(\varphi_n - \varphi_{n-1})], \quad \Pi = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \arctan(\dot{\varphi}_n), \quad (4)$$

играющие роль соответственно энергии и топологического заряда возбуждения решётки [2].

На рис. 2а приведены зависимости смещений вдоль цепочки 26-го, 28-го и 30-го атома от времени. Из моделирования следует, что все атомы в бризере колеблются с одинаковой и постоянной частотой, амплитуда колебаний постоянна в пределах времени моделирования и уменьшается экспоненциально с удалением от центра бризера.

На рис. 2б приведена зависимость смещений атомов от номера узла спустя время равное 32 периодам колебаний после начала счёта. Видно, что бризер устойчив и сохраняет свою форму с течением времени.

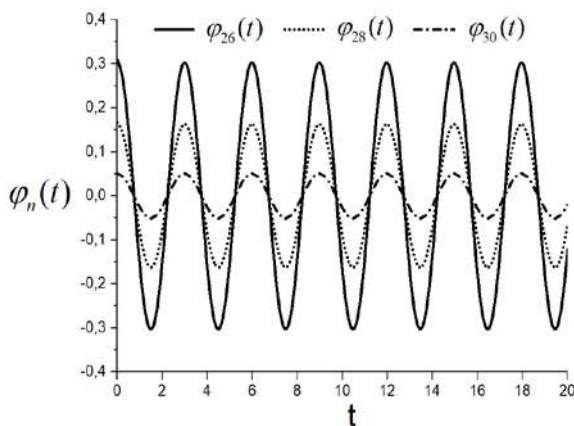


Рис. 2а. Зависимости смещений вдоль цепочки 26-го, 28-го и 30-го атома от времени

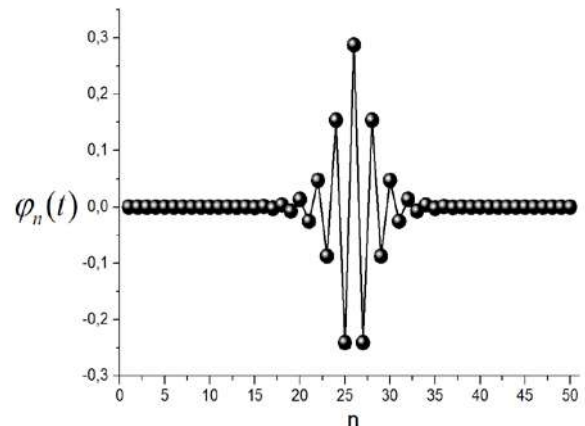


Рис. 2б. Зависимость смещений атомов от номера узла спустя 32 периода колебаний после начала счёта

Параметры: $n_c = 26$, $\kappa = 0.8$; $k = \pi$, $\alpha = \pi/3$

Моделирование нелинейной динамики обобщенной решётки Хироты

Далее перейдём к моделированию динамики обобщённой решётки Хироты, состоящей из атомов заданных масс и учитывающей такие физические эффекты, как диссипация и внешняя накачка. В безразмерных переменных система уравнений, описывающих обобщённую решётку Хироты, имеет следующий вид [4]:

$$\frac{M_n \ddot{\varphi}_n}{1 + M_n \dot{\varphi}_n^2} = \operatorname{tg}(\varphi_{n-1} - \varphi_n) - \operatorname{tg}(\varphi_n - \varphi_{n+1}) - \lambda_n \dot{\varphi}_n + f_n(\varphi_n, t). \quad (5)$$

Здесь обозначено: $\varphi_n = \varphi_n(t)$ – смещение n -го атома массы M_n из положения равновесия; λ_n – коэффициенты диссипации атомов, $f_n(\varphi_n, t)$ – внешняя переменная сила, действующая на n -й атом. Пространственный индекс и время изменяются в следующих диапазонах: $n=1, 2, \dots, N$, $t=0, \dots, t_{\max}$.

Будем считать, что цепочка состоит из атомов одного сорта, и положим $M_n = 1, \forall n$. Рассмотрим влияние диссипации на нелинейную динамику цепочки. Пусть $\lambda_n = \lambda, \forall n$. Внешние силы не учитываем $f_n(\varphi_n, t) = 0$. В качестве начального условия возьмём выражение (2), которое является точным решением уравнения (1).

На рис. 3а приведены зависимости смещений вдоль цепочки 16-го, 18-го и 20-го атома от времени. Из моделирования следует, что с течением времени частоты атомов в бризере начинают отличаться, появля-

ється сдвиг фаз колибаний атомів, амплітуда колибаний кожного атома убиває експоненціально из-за диссипації, а также убиває експоненціально с удалением от центра бризера.

На рис. 3б приведена зависимость смещений атомов от номера узла спустя время равное 4 периодам колибаний после начала счёта. Видно, что амплітуда бризера существенно уменьшилась, но при этом он сохраняет свою форму и локализацию с течением времени.

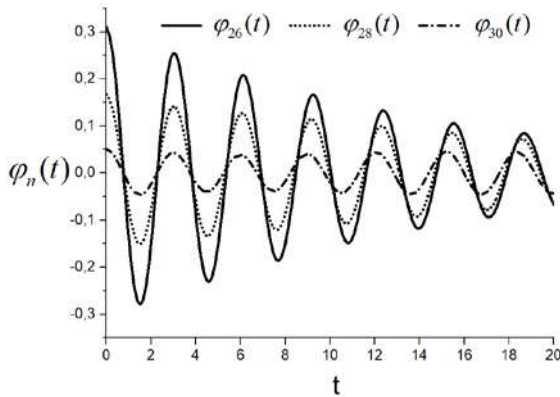


Рис. 3а. Зависимости смещений вдоль цепочки
26-го, 28-го и 30-го атома от времени,
 $N = 50, n_c = 26$

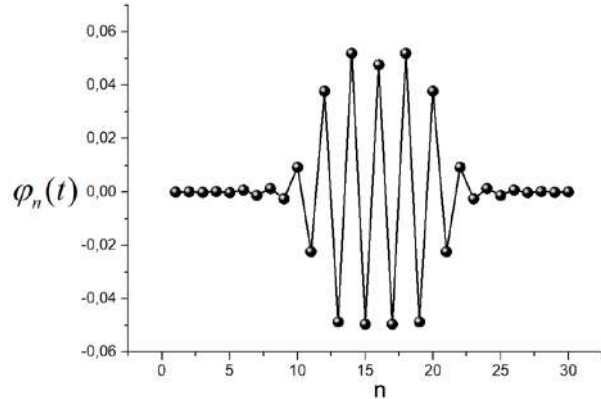


Рис 3б. Зависимость смещений атомов от номера узла спустя 4
периода колибаний после начала счёта, $N = 30, n_c = 16$

Параметры: $\kappa = 0.8, k = \pi, \alpha = \pi/3, \lambda = 0.01$

Таким образом, получившиеся нелинейные возбуждения представляют собой диссипативные квазибризеры. В дальнейшем будем считать, что цепочка состоит из чередующихся атомов разных масс:

$$M_n = \begin{cases} M_{\text{лёгкий}} \equiv 1, & n = 2m + 1, \\ M_{\text{тяжёлый}} \equiv M, & n = 2m. \end{cases} \quad (6)$$

При этом, как известно, зависимость частоты от квазиволнового числа для линейных волн имеет акустическую и оптическую ветви колибаний, разделённые щелью. Причём акустической ветви соответствуют частоты в интервале $[0, \omega_1]$, акустической щели соответствует интервал $[\omega_1, \omega_2]$, а оптической ветви – интервал $[\omega_2, \omega_3]$:

$$\omega_1 = \sqrt{\frac{2}{M_{\text{тяжёлый}}}} = \sqrt{\frac{2}{M}}, \quad \omega_2 = \sqrt{\frac{2}{M_{\text{лёгкий}}}} = \sqrt{2}, \quad \omega_3 = \sqrt{\frac{2}{\mu}} = \sqrt{2\left(1 + \frac{1}{M}\right)}, \quad (7)$$

где $\mu = M_{\text{лёгкий}} M_{\text{тяжёлый}} / (M_{\text{лёгкий}} + M_{\text{тяжёлый}}) = M / (1 + M)$ – приведенная масса лёгкого и тяжелого атомов.

Будем считать, что диссипация и внешние силы отсутствуют $\lambda_n = 0, f_n(\varphi_n, t) = 0, \forall n$. В качестве начального условия возьмём выражение (2). Выберем следующие значения для масс лёгкого и тяжелого атомов: $M_{\text{лёгкий}} = 1, M_{\text{тяжёлый}} = 106$, такие значения близки к массам водорода и палладия в гидриде палладия PdH. Тогда циклические частоты (7) будут равны:

$$\omega_1 = \frac{1}{\sqrt{53}} \approx 0.137, \quad \omega_2 = \sqrt{2} \approx 1.414, \quad \omega_3 = \sqrt{\frac{107}{53}} \approx 1.421. \quad (8)$$

На рис. 4 приведены зависимости смещений вдоль цепочки 26-го (тяжёлого), 27-го (лёгкого) и 28-го (тяжёлого) атома от времени. Из моделирования следует, что лёгкий атом, находящийся между двумя тяжёлыми атомами совершает колебания с примерно постоянной амплитудой и частотой. Массивные атомы при этом практически неподвижны. Циклическая частота колеблющегося лёгкого атома примерно равна $\Omega \approx 1.571$. Таким образом, получившееся нелинейное возбуждение представляет собой высокочастотный квазибризер с частотой выше оптической ветви фононных колибаний двухатомной цепочки.

Дискретные бризеры являются распространёнными объектами в нелинейных дискретных системах. Перспективным является переход от изучения дискретных бризеров в модельных системах, таких как одноатомная и двухатомная решётки Хироты, к исследованию динамики и свойств таких возбуждений в моделях реальных двумерных и трёхмерных кристаллов, а также квазикристаллов. При этом значительную роль играют экспериментальные, а также численные методы, использующие реалистичные межатомные потенциалы, соответствующие различным соединениям – металлам, сплавам, ионным кристаллам и др. Численное моделирование позволит в

дальнейшем понять роль дискретных бризеров в формировании свойств реальных кристаллов и даст фундамент для использования дискретных бризеров в новых технологиях. К слабо изученным вопросам, связанным с дискретными бризерами, можно отнести: разработка методов возбуждения ДБ и определение наиболее эффективных начальных условий для формирования долгоживущих локализованных колебаний, определение свойств ДБ таких как диапазон энергий, частот бризера, амплитуда, частота, степень локализации, время жизни и т.д. для кристаллов с различными типами связей, проведение квантовомеханических расчётов с целью уточнения данных, полученных методами молекулярной динамики, исследование термofлуктуационного зарождения ДБ, изучения свойств ДБ при конечных температурах, исследование влияния ДБ на кинетические процессы и явления переноса в твёрдых телах, оценка вклада ДБ в процессы переноса заряда, магнитного момента, теплопроводность, взаимодействие ДБ с дефектами в кристаллах.

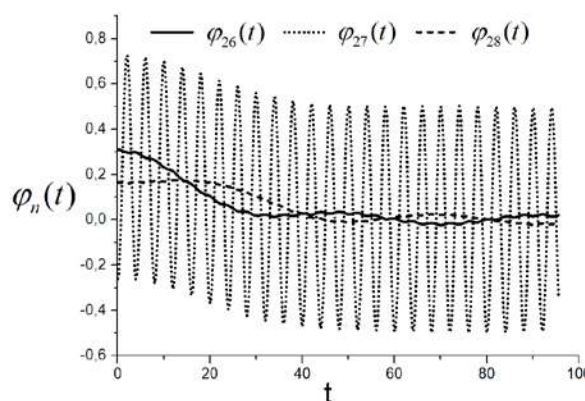


Рис. 4а. Зависимости смещений вдоль цепочки 26-го, 27-го и 28-го атома от времени

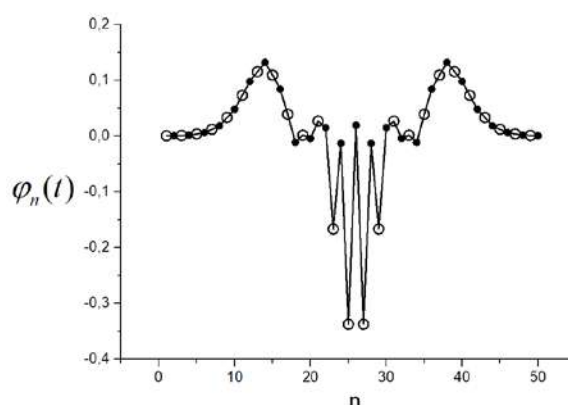


Рис. 4б. Зависимость смещений атомов от номера узла спустя 32 периодов колебаний после начала счёта

Параметры: $n_c = 26$, $\kappa = 0.8$, $k = \pi$, $\alpha = 0$, $\lambda = 0$, $M = 106$

Выводы

В работе численно моделируется динамика нелинейных локализованных колебаний – дискретных бризеров и квазibriзеров в одноатомной и двухатомной ангармонической цепочке атомов. Разработан алгоритм решения уравнения обобщённой решётки Хироты, основанный на методе Рунге-Кутты 4-го порядка. Показана устойчивость дискретных квазibriзеров в обобщённой решётке Хироты при малых диссипациях. В этом случае происходят незначительные изменения со временем формы и физических характеристик, таких как амплитуда, частота и скорость огибающей квазibriзера. Характерные времена таких изменений намного больше периода осцилляций квазibriзера. При больших коэффициентах диссипации наблюдается излучение квазibriзером линейных волн и резкое его затухание. Рассмотрен случай двухатомной цепочки Хироты, состоящей из чередующихся лёгких и тяжёлых атомов. Для такой системы получен дискретный квазibriзер, который представляет собой колеблющийся лёгкий атом, находящийся между двумя тяжёлыми атомами, совершающий колебания с примерно постоянной амплитудой и частотой. Массивные атомы при этом практически неподвижны. Циклическая частота колеблющегося лёгкого атома лежит выше оптической ветви фононных колебаний двухатомной цепочки.

Список использованной литературы

1. Flach S. Discrete breathers – Advances in theory and applications / S. Flach, A.V. Gorbach // Phys. Rep. – 2008. – V. 467, № 1. – P. 1–116.
2. Bogdan M.M. Exact discrete breather solutions and conservation laws of lattice equations / M.M. Bogdan, G.A. Maugin // Proc. Est. Acad. Sci. Phys. Math. – 2003. – V. 52, №1. – P. 76-84.
3. Hirota R. Exact N-soliton solution of nonlinear lumped self-dual network equations / R. Hirota // J. Phys. Soc. Jpn. – 1973. – V. 35, № 1. – P. 289-294.
4. Laptev D.V. Nonlinear periodic waves solutions of the nonlinear self-dual network equations / D.V. Laptev, M.M. Bogdan // J. Math. Phys. – 2014. – V.55, № 4. – 042903-1 – 042903-15.
5. Chechin G.M. Discrete breathers and nonlinear normal modes in monoatomic chains / G.M. Chechin, G.S. Dzhelauhova // Journal of Sound and Vibration (JSV). – 2009. – V. 322, №3. – P. 490–512.