

УДК 538.9+517.9

*Марія Пасєка,
студентка факультету математики, фізики
і комп'ютерних наук
Вінницького державного педагогічного університету
імені Михайла Коцюбинського*

МОДЕЛЬ ФРЕНКЕЛЯ–КОНТОРОВОЇ І ФІЗИКА НЕСПІВМІРНИХ СИСТЕМ

Анотація. У статті розглянуто одну з моделей фізики неспівмірних систем, а саме модель пружно-шарнірно-зчленованої молекули. А також описано як звести таку модель до моделі типу Френкеля–Конторової.

Ключові слова: модель Френкеля–Конторової, фізика неспівмірних систем, пружно-шарнірно-зчленована молекула.

Abstract. In this article, one of the models of physics of incommensurable systems, namely, the model of an elastically hinged molecule is considered. It also described how to reduce such a model to a Frenkel-Kontorova model.

Key words: Frenkel-Kontorova model, physics of incommensurable systems, elastically hinged molecule.

Модель Френкеля–Конторової описує динаміку ланцюга частинок, які взаємодіють із найближчими сусідами за наявності деякого зовнішнього періодичного потенціалу ([1, 6]). Такий ланцюжок частинок схематично зображено на рис. 1. Деякі застосування моделі Френкеля–Конторової до фізичних систем різного типу описані у роботах [2 – 5].

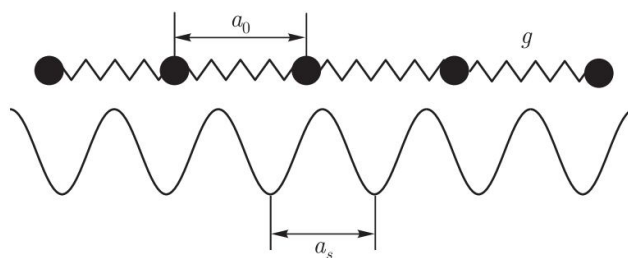


Рис. 1. Схематичне зображення моделі Френкеля–Конторової, де g – коефіцієнт жорсткості, a_s – період і a_0 – рівноважний крок

Ще одне застосування моделі Френкеля–Конторової пов'язане із фізикою неспівмірних систем. А саме, якщо розглянемо ланцюг із вільними кінцями і припустимо, що рівноважна відстань між взаємодіючими частинками не збігається з періодом потенціалу підкладки, то отримаємо одну з найпростіших фізичних моделей із двома (або більше) конкуруючими шкалами довжини. У цьому випадку зміст моделі Френкеля–Конторової розширюється через можливість існування двох різних типів основного стану системи – співмірного і неспівмірного. Таким чином, модель Френкеля–Конторової також з'являється в багатьох застосуваннях, пов'язаних із фізикою неспівмірних систем.

У деяких системах, неспівмірна фаза може з'явитися як проміжна між двома співмірними кристалічними фазами, і тому вона відіграє важливу роль у теорії фазових переходів [8]. Більше того, у деяких випадках дослідження неспівмірної фази можна звести до аналізу моделі типу Френкеля–Конторової. Для конкретності розглянемо модель, що описує послідовність твердих молекул, з'єднаних між собою пружними стрижнями з постійною згинальною жорсткістю g , як показано на рис. 2 ([9, 10]). Пружні стрижні прагнуть зберегти лінійність ланцюга, оскільки вони створюють момент, що прагне зменшити абсолютне значення кута обертання. Далі піддамо ланцюжок поздовжній силі стиснення $P > 0$, яка прагне порушити горизонтальну впорядкованість молекул. У результаті протидії цих двох сил виникає поперечна модуляційна нестійкість. Ефекти, пов'язані з тривимірністю кристала, можна врахувати в рамках лінійного молекулярного ланцюга за допомогою додаткових ефективних зв'язків, показаних на рис. 2 вертикальними пружинами.

Припустимо, що поперечні зміщення стрижнів v_n малі, $v_n \ll 1$. Тоді гамільтоніан моделі можна записати у формі

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

яка відповідає так званій моделі пружно-шарнірно-зчленованої молекули (Elastically Hinged Molecule).

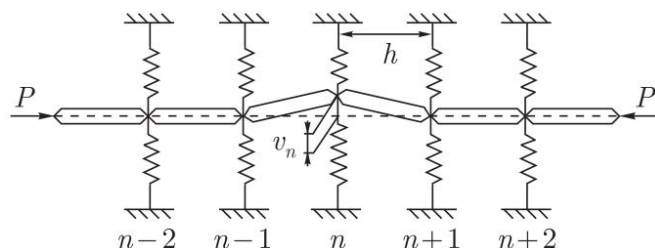


Рис. 2. Схематичне зображення моделі пружно-шарнірно-зчленованої молекули

Використовуючи тотожність $\sum_n v_n v_{n+j} = \sum_n v_{n+l} v_{n+j+l}$, гамільтоніан легко переписати у формі, що відповідає ланцюгу точкових частинок із гармонійною взаємодією перших і других сусідніх частинок із жорсткістю взаємодії $C_1 = 4g - P$ і $C_2 = -Fg$ та з потенціалом підкладки, що є многочленом четвертого порядку. Увівши нові координати $x_n = v_{n+1} - v_n$ і $y_n = v_{n+1} + v_n$, можна показати, що статичні властивості моделі пружно-шарнірно-зчленованої молекули ідентичні властивостям моделі Янсена ([8]). Зауважимо, що за відсутності потенціалу підкладки неспівмірна фаза може виникати тільки якщо врахувати взаємодію третіх сусідів.

Для того, щоб показати, як модель пружно-шарнірно-зчленованої молекули та інші подібні моделі можна звести до моделі типу Френкеля–Конторової, розглянемо зміну структури моделі молекули при повільному зменшенні жорсткості g і фіксованому значенні зовнішнього тиску P . При великому значенні жорсткості g система має лише один тривіальний розв'язок $v_n = 0$. Критичним значенням жорсткості g , залежним від значення P , буде те, за якого дисперсійна крива перетворюється в нуль при $q = 2\pi k$. У результаті цього фазового переходу другого роду в кристалі з'являється синусоїдальна модуляція з хвильовим числом k . Якщо число k – ірраціональне, то період модуляційної фази буде нескінченно довгим, а кінцева структура описуватиметься неспівмірною фазою. Для

раціонального значення хвильового числа $k = \frac{r}{q}$, де r і q – співмірні додатні числа, такі що $2r < q$ і k наближається до $\frac{1}{4}$, структура кристала може бути описана як чотирьох-періодична з невідомою повільно змінною фазою $\varphi_n(t)$,

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

де $A^2 = 2(2P - 4g - 1)$ – амплітуда співмірної чотирьох-періодичної структури. Усереднюючи швидко змінні члени по чотирьох сусідніх вузлах і враховуючи, що φ_n змінюється повільно, $|\varphi_n - \varphi_{n-1}| \ll 1$, можна одержати рівняння руху

$$\frac{d^2 \varphi_n}{dt^2} - 4g(\varphi_{n-1} - 2\varphi_n + \varphi_{n+1}) + \frac{A^2}{4} \sin(4\varphi_n) = 0, \quad (3)$$

яке можна звести до канонічної форми моделі Френкеля–Конторової.

Література:

1. Braun O. M., Kivshar Y. S. The Frenkel-Kontorova model. Berlin: Springer, 2004. 427 p.
2. Atkinson W., Cabrera N. Motion of a Frenkel-Kontorowa dislocation in a one-dimensional crystal. *Phys. Rev.* 1965. Vol. 138 A. P. 763–794.
3. Aubry S. Breathers in nonlinear lattices: Existence, linear stability and quantization. *Physica D.* 1997. Vol. 103. P. 201–250.
4. Aubry S. Discrete breathers in anharmonic models with acoustic phonons. *Ann. Inst. H. Poincare, Phys. theorique.* 1998. Vol. 68. P. 381–420.
5. Бак С., Ковтонюк Г., Українець Н. Застосування моделі Френкеля–Конторової. Науково-популярний альманах «Математика та інформатика навколо нас» [Електронне мережне видання]. Вінниця, 2022. Випуск 6. С. 83–94.
6. Бак С. М. Основи теорії солітонів. Навчальний посібник (для студентів спеціальності 111 Математика). Вінниця: ФОП Рогальська І. О., 2021. 100 с.
7. Janssen T., Blinc R., Levanyuk A. P. Incommensurate Phases in Dielectrics: Part 1, Fundamentals Modern Problems in Condensed Matter Sciences. *Elsevier Science Ltd.* 1986. Vol. 14.1. 360 p.
8. Blinc R., Levanyuk A. P. Incommensurate Phases in Dielectrics: Part 2, Materials. *Ex-Library.* 1986. Vol. 14.2. 402 p.
9. Shigenari T., Dmitriev S. V., Abe K. Thermally activated motion of domain wall in a crystal with a small degree of discreteness. *Comp. Mater. Sci.* 1998. Vol. 11. P. 227–232.
10. Shigenari T., Dmitriev S. V., Vasiliev A. A., Abe K. Domain Wall Solutions for EHM Model of Crystal. *J. Phys. Soc. Jpn.* 1999. Vol. 68. P. 117–125.

Науковий керівник: докт. фіз.-мат. наук, професор Бак Сергій Миколайович.