

## Щелевые солитоны в ангармонической двухатомной решетке

© О.Н. Ермакова, В.Ф. Марченко, А.П. Сухоруков

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,  
119899 Москва, Россия

(Поступила в Редакцию 10 июля 1996 г.)

Методом связанных волн изучены локализованные стационарные моды, частота которых лежит в запрещенной области упругих колебаний двухатомной ангармонической решетки. Выяснены механизмы просветления решетки в случаях узкой и широкой полосы запрещенной области частот и найдены аналитические выражения для стационарных щелевых солитонов.

Одним из характерных проявлений ангармонизма колебаний решетки твердого тела являются нелинейные локализованные моды, частота которых лежит в запрещенной области спектра фононных колебаний, а интенсивность достаточна для локального просветления среды [1,2]. Как показали численные эксперименты [3], эти моды могут играть заметную роль в эволюции спектра колебаний при однородном возбуждении одномерной ангармонической решетки.

С физической точки зрения нелинейные локализованные моды аналогичны щелевым или брэгговским солитонам, возникающим в периодической нелинейной среде [4–6]. Наиболее распространенной здесь моделью является диэлектрик, диэлектрическая проницаемость которого периодически меняется вдоль одной или двух координат и, кроме того, зависит от интенсивности светового поля. При возбуждении такой среды в области брэгговского резонанса возможно нелинейное просветление, которое лежит в основе двух интенсивно изучаемых в настоящее время эффектов. В ограниченной системе возникает бистабильность, поскольку коэффициенты отражения и преломления неоднозначно зависят от интенсивности падающей волны [7]. В бесконечной (или согласованной на концах) периодической системе могут существовать щелевые солитоны, представляющие собой локализованные возбуждения, скорость которых равна или близка к нулю, а солитонная форма огибающей является своеобразным балансом между реактивным затуханием и нелинейным просветлением среды.

Общепринятым методом описания нелинейных свойств брэгговского резонанса периодической структуры является метод связанных волн (см., например, [8]). Этот метод может быть использован в теории колебаний квазипериодических решеток твердого тела. Если простейшую модель решетки — цепочку одинаковых атомов, учитывающую взаимодействие только между соседними частицами, — рассматривать как однородную дискретную среду, то уже более сложная модель — двухатомная цепочка — представляет собой дискретную среду с периодически меняющимися параметрами. Возникающая в такой цепочке запрещенная область частот, разделяющая дисперсионные ветви акустических и оптических про-

дольных колебаний, является полным аналогом области первого брэгговского резонанса одномерной периодической непрерывной среды.

Цель настоящей статьи — исследование локализованных мод в области брэгговского резонанса нелинейной двухатомной цепочки методом связанных волн. В известных нам работах [9,10] эти моды исследовались в первую очередь численными методами. Найденные аналитические решения с помощью функции Грина приведены в форме, трудно поддающийся анализу, и поэтому вопрос о различных механизмах просветления и соответствующих им типах собственных пространственных мод двухатомной решетки остается открытым.

### 1. Основные соотношения

Уравнение движения для атомов с массами  $M$  и  $m$  ( $M > m$ ) двухатомной цепочки и потенциалом взаимодействия между соседними атомами, содержащим квадратичный и квартичный члены, запишем в универсальном виде

$$m_0(1 + \eta \cos \pi n)\ddot{x}_n - k_2(x_{n+1} + x_{n-1} - 2x_n) - k_4[(x_{n+1} - x_n)^3 - (x_n - x_{n-1})^3] = 0, \quad (1)$$

где  $n = 1, 2, 3, \dots$ ,  $m_0 = (M + m)/2$ ,  $\eta = (M - m)/(M + m)$ ,  $k_2, k_4$  — линейная и нелинейная константы связи,  $x_n$  — смещение  $n$ -го атома от положения равновесия.

Рассматривая (1) как уравнение с периодически меняющимся параметром (массой), получим ряд соотношений для линейной цепочки ( $k_4 = 0$ ). Решение представим в форме Флоке

$$x_n = \sum_{m=-\infty}^{\infty} B_m \exp[i\omega t - i(\beta + \pi m)n] = B_0 \exp(i\omega t) [\exp(-i\beta n) + \mu \exp(-i(\beta - \pi)n)], \quad (2)$$

где  $\beta$  — набег фазы на ячейку,  $\mu = B_{-1}/B_0$ .

Если для непрерывной периодической среды ограничение ряда двумя основными пространственными гармониками является приближением, то для периодически дискретной среды оно является точным.

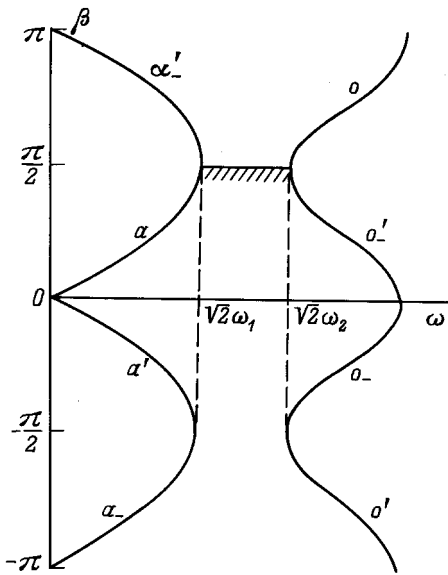


Рис. 1. Дисперсионные ветви колебаний одномерной двухатомной решетки.

Любые другие ветви колебаний с волновыми числами  $\beta + \pi t$  сводятся либо к ветви  $\beta$ , либо к ветви  $\beta - \pi$ . Подставляя (2) в (1), получим известное дисперсионное уравнение

$$\omega^4 - 2\omega^2(\omega_1^2 + \omega_2^2) + 4\omega_1^2\omega_2^2 \sin^2 \beta = 0 \quad (3)$$

и отношение амплитуд

$$\mu = \frac{(1 - \omega^2/2\omega_2^2)^{1/2} - (1 - \omega^2/2\omega_1^2)^{1/2}}{(1\omega^2/2\omega_2^2)^{1/2} + (1 - \omega^2/2\omega_1^2)^{1/2}}, \quad (4)$$

где  $\omega_1^2 = k_2/M$ ,  $\omega_2^2 = k_2/m$ .

Дисперсионные характеристики двухатомной цепочки изображены на рис. 1. На заданной частоте возбуждается пара волн, имеющих одинаковые групповые скорости и разные по величине и направлению фазовые скорости. Амплитуды этих волн не являются независимыми. Это обстоятельство позволяет ответить на вопрос: какой вид дисперсии преобладает в полосах пропускания цепочки. Правильный ответ состоит в том, что и в акустическом, и в оптическом диапазонах частот возбуждаются волны как с нормальной, так и аномальной дисперсией, причем волны с нормальной дисперсией всегда имеют большую амплитуду, за исключением граничных частот  $\sqrt{2}\omega_1$  и  $\sqrt{2}\omega_2$ , где  $\mu = 1$ . Нередко встречающееся утверждение (см., например, монографию [11]) о том, что в оптическом диапазоне имеет место аномальная дисперсия, является неточным и основано на неправильном выборе интервала изменения  $\beta$  от  $-\pi/2$  до  $\pi/2$ .

При распространении волны в прямом направлении (ветви  $a$ ,  $a_-$  или  $o$ ,  $o_-$  на рис. 1) обратные волны (ветви  $a'$ ,  $a'_-$  или  $o'$ ,  $o'_-$ ) не возбуждаются,

поскольку их волновые числа сильно отличаются от волновых чисел прямой волны. Ситуация меняется, если частота попадает в запрещенную область. В этой области  $\beta = (\pi/2) + i\beta''$ ,  $|\mu| = 1$ , и между волнами возникает сильная связь (пространственный синхронизм). Именно это обстоятельство и дает основание представить решение уравнения (1) в виде пары распространяющихся навстречу друг другу волн, амплитуды которых "группируют" волны с близкими фазовыми скоростями.

Представляя решение в виде

$$x_n = A_1(n)e^{i(\omega t - (n\pi/2))} + A_2(n)e^{i(\omega t + (n\pi/2))} + \text{с.с.},$$

$$n = 1, 2, 3, \dots,$$

получим систему уравнений

$$\begin{aligned} \frac{i}{2}(A_1(n+1) - A_1(n-1)) + \Delta A_1(n) - \sigma A_2(n) + \chi_{12}(n) &= 0, \\ \frac{i}{2}(A_2(n-1) - A_2(n+1)) + \Delta A_2(n) - \sigma A_1(n) + \chi_{21}(n) &= 0, \end{aligned} \quad (5)$$

где

$$\begin{aligned} \chi_{21}(n) = \frac{\chi}{2} \{ & A_1(n) [ |A_1(n)|^2 + 2|A_2(n)|^2 + |A_1(n-1)|^2 \\ & + |A_2(n-1)|^2 + |A_1(n+1)|^2 + |A_2(n+1)|^2 ] \\ & + \frac{1}{2} A_1^*(n) [ 2A_2^2(n) - A_1^2(n-1) - A_2^2(n-1) \\ & - A_1^2(n+1) - A_2^2(n+1) ] \\ & + A_1(n-1) [ A_2^*(n)A_2(n-1) - A_2(n)A_2^*(n-1) ] \\ & + A_1(n+1) [ A_2^*(n)A_2(n+1) - A_2(n)A_2^*(n+1) ] \\ & - A_1^*(n-1)A_2(n)A_2(n-1) \\ & - A_1^*(n+1)A_2(n)A_2(n+1) \}. \end{aligned}$$

Здесь  $\chi_{21}$  совпадает по форме с  $\chi_{12}$  при замене индексов  $1 \leftrightarrow 2$ ,  $\sigma = m_0\eta\omega^2/2k_2$ ,  $\chi = 6k_4/k_2$ .

Параметр  $\Delta = 1 - \omega^2 m_0/2k_2$  характеризует отстройку частоты возбуждения от частоты  $\omega^* = 2\omega_1^2\omega_2^2/\sqrt{\omega_1^2 + \omega_2^2}$ , при которой имеет место максимальное линейное затухание в запрещенной полосе частот.

Уравнения (5) справедливы при любых соотношениях параметров  $\Delta$ ,  $\sigma$  и  $\chi$ . Поскольку в реальном кристалле нелинейный сдвиг частоты, обусловленный ангармонизмом потенциала взаимодействия,  $\omega_{ie} \sim \chi B_0^2$  всегда мал, интерес представляют два характерных случая. В первом случае  $\Delta\omega_{nl} \sim \Delta\omega_{12} = \sqrt{2}(\omega_2 - \omega_1)$  (просветление возможно для любых частот, лежащих в области  $\sqrt{2}\omega_1 < \omega < \sqrt{2}\omega_2$ ), во втором  $\Delta\omega_{nl} \ll \Delta\omega_{12}$  (просветление возможно лишь в окрестности граничных частот). В указанных случаях в уравнениях (5) можно перейти к пределу непрерывной среды и получить точные аналитические решения.

## 2. Типы локализованных мод

1) Узкая полоса (массы  $M$  и  $m$  близки друг к другу). Учитывая, что параметры  $\Delta$ ,  $\sigma$  и  $\chi$  имеют один порядок малости  $\varepsilon$ , воспользуемся разложением

$$A_j(n \pm 1) = A_j(n) \pm \varepsilon \frac{dA_j(n)}{dn} + \varepsilon^2 \frac{d^2 A_j(n)}{dn^2} + \dots, \\ j = 1, 2.$$

С точностью до членов порядка  $\varepsilon^2$  система (5) примет вид

$$i \frac{dA_1}{dx} + \Delta A_1 - \sigma A_2 + \chi(A_1|A_1|^2 + 2A_1|A_2|^2 - A_2^2 A_1^*) = 0, \\ -i \frac{dA_2}{dx} + \Delta A_2 - \sigma A_1 + \chi(A_2|A_2|^2 + 2A_2|A_1|^2 - A_1^2 A_2^*) = 0. \quad (6)$$

Здесь  $x = n$  — непрерывная координата (расстояние между атомами полагаем равным единице). Система (6) отличается от уравнений, приведенных в [5], наличием членов  $A_2^2 A_1^*$  и  $A_1^2 A_2^*$ , которые для непрерывной периодической среды при усреднении обращаются в нуль.

Система (6) имеет интеграл движения  $|A_1|^2 - |A_2|^2 = G$ . Поскольку нас интересуют решения, обращющиеся в нуль при  $x \rightarrow \pm\infty$ ,  $G = 0$  и амплитуды прямой и обратной волн удобно представить в виде

$$A_1(x) = a(x)e^{i\varphi(x)}, \quad A_2(x) = a(x)e^{-i\varphi(x)}.$$

В результате получим систему уравнений для действительных амплитуд и фаз

$$\frac{da}{dx} = -\sigma a \sin 2\varphi - \chi a^3 \sin 4\varphi, \\ \frac{d\varphi}{dx} = \Delta - \sigma \cos 2\varphi + \chi a^2 (3 - \cos 4\varphi). \quad (7)$$

Используя интеграл, следующий из (7),

$$\frac{\chi}{2} a^2 (3 - \cos 4\varphi) + \Delta - \sigma \cos 2\varphi = 0,$$

сведем систему к уравнению для фазы двойного уравнения син-Гордона

$$\frac{d^2 \varphi}{dx^2} - 2\sigma \Delta \sin 2\varphi + \sigma^2 \sin 4\varphi = 0. \quad (8)$$

Уравнение (8) имеет два типа кинковых и антикинковых решений

$$\varphi_I^\pm = \pi m \pm \arctg \left[ \sqrt{\frac{\sigma - \Delta}{\sigma + \Delta}} \operatorname{th} \left( \sqrt{\sigma^2 - \Delta^2} (x - x_0) \right) \right], \\ \varphi_{II}^\pm = \frac{\pi}{2} (2m + 1) \pm \arctg \left[ \sqrt{\frac{\sigma + \Delta}{\sigma - \Delta}} \operatorname{th} \left( \sqrt{\sigma^2 - \Delta^2} (x - x_0) \right) \right]. \quad (9)$$

Подставляя данные решения в уравнения для фазы (7), можно убедиться в том, что локализованная мода в полосе частот  $\sqrt{2}\omega_1 < \omega < \sqrt{2}\omega_2$  при положительном знаке  $\chi$  возможна лишь для первого класса решений  $\varphi_I^+$  и имеет вид

$$(\sigma - \Delta) \operatorname{sech}^2 \left[ \sqrt{\sigma^2 - \Delta^2} (x - x_0) \right] \times \\ \times \left[ 1 + \frac{\sigma - \Delta}{\sigma + \Delta} \operatorname{th} \left( \sqrt{\sigma^2 - \Delta^2} (x - x_0) \right) \right] \\ a_I^2 = \frac{\chi \left\{ 1 + 6 \frac{\sigma - \Delta}{\sigma + \Delta} \operatorname{th}^2 \left( \sqrt{\sigma^2 - \Delta^2} (x - x_0) \right) + \right. \\ \left. + \left( \frac{\sigma - \Delta}{\sigma + \Delta} \right)^2 \operatorname{th}^4 \left( \sqrt{\sigma^2 - \Delta^2} (x - x_0) \right) \right\}}{(10)}$$

Если  $\chi < 0$ , то локализованная мода существует лишь для второго класса решений  $\varphi_{II}^-$  и имеет вид (10) при замене  $\Delta$  на  $-\Delta$ .

В точке  $\omega = \omega^* (\Delta = 0)$  эти выражения совпадают

$$a_I^2 = a_{II}^2 = \frac{\sigma}{|\chi|} \frac{\operatorname{ch} 2\sigma (x - x_0)}{|\chi| \operatorname{ch} 4\sigma (x - x_0)}. \quad (11)$$

Принципиальным условием существования локализованных мод является пространственная модуляция фазы, которая обеспечивает просветление периодической цепочки. В рамках нашего подхода поле в запрещенной области представляет собой стоячую волну, положение максимумов и минимумов которой зависит от частоты. Для линейной цепочки при  $\omega \approx \sqrt{2}\omega_1$  ( $\sigma = \Delta$ ) максимум приходится на тяжелые атомы, а минимум — на легкие (это связано с хорошо известным фактом, что атомы с массой  $m$  покоятся). При  $\omega \approx \sqrt{2}\omega_2$  ( $\sigma = -\Delta$ ), наоборот, колеблются только легкие атомы. Именно в этих условиях действие нелинейности наиболее эффективно. Например, при  $\omega \approx \sqrt{2}\omega_1$  с увеличением интенсивности возбуждения, как следует непосредственно из уравнения (1) при  $k_4 > 0$ , происходит динамическое увеличение коэффициента связи для тяжелых частиц (или увеличение их собственной частоты колебаний). При неизменной собственной частоте колебаний легких частиц это приводит к уменьшению коэффициента модуляции и, следовательно, ширины запрещенной полосы. В окрестности  $\omega \approx \omega^*$  уменьшаются обе собственные частоты колебания частиц, поэтому коэффициент модуляции практически не меняется. Изменение фазы в области возбуждения моды как раз обеспечивает необходимый сдвиг максимумов стоячей волны. Вне этой области стоячая волна приобретает вид, характерный для линейной цепочки.

Используя (9) и (11), найдем амплитуды колебаний тяжелый  $A$  и легких  $B$  атомов при  $\chi > 0$

$$A = A_1 + A_2 = 2a \cos \varphi_I^+ = 2 \sqrt{\frac{\sigma}{|\chi|}} \frac{\operatorname{ch} \sigma x}{\sqrt{\operatorname{ch} 4\sigma x}}, \\ B = A_1 - A_2 = 2ia \sin \varphi_I^+ = 2i \sqrt{\frac{\sigma}{|\chi|}} \frac{\operatorname{sh} \sigma x}{\sqrt{\operatorname{ch} 4\sigma x}}. \quad (12)$$

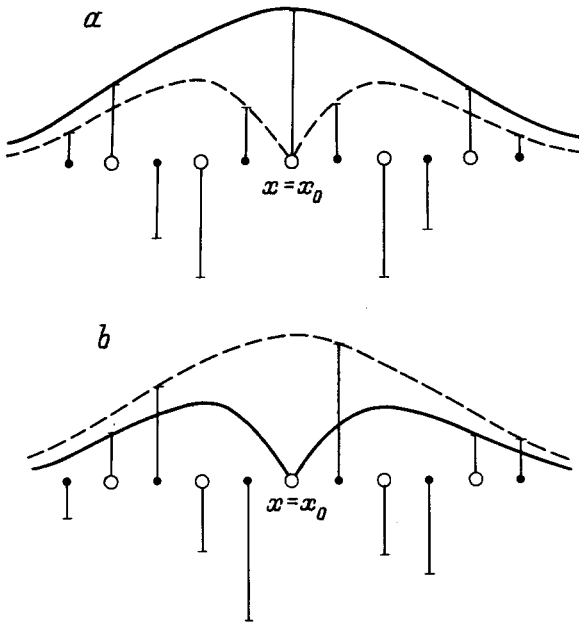


Рис. 2. Распределения амплитуд колебаний тяжелых (сплошные кривые) и легких атомов (штриховые кривые) и их мгновенные смещения в области возбуждения при  $\chi > 0$  (a) и  $\chi < 0$  (b).

При  $\chi < 0$  выражения для  $A$  и  $B$  меняются местами. Пространственное распределение амплитуд и мгновенные значения смещений  $x_n$  атомов проиллюстрированы на рис. 2. По своей структуре найденные моды близки к четным и нечетным модам, обсуждаемым в работе [12] для моноатомной цепочки, однако в данном случае наличие атомов другого сорта приводит к своеобразной комбинации этих мод при одном знаке нелинейности.

2) Широкая полоса (соотношение масс  $M$  и  $m$  произвольно). Рассмотрим случай, когда частота возбуждения слегка превышает нижнюю граничную частоту. Исключив из (5)  $A_2$ , приходим к уравнению для амплитуды прямой волны

$$A_1(n+2) + A_1(n-2) - 2A_1(n) + 4(\Delta^2 - \sigma^2)A_1(n) + 4\sigma\chi_{21}(n) + 4\Delta\chi_{12}(n) + 2i[\chi_{12}(n-1) - \chi_{12}(n+1)] = 0. \quad (13)$$

В этом уравнении появляется малый параметр  $\delta_1$ , характеризующий отстройку частоты возбуждения от нижней граничной частоты

$$\Delta^2 - \sigma^2 = \frac{(\omega^2 - 2\omega_1^2)(\omega^2 - 2\omega_2^2)}{4\omega_1^2\omega_2^2} = -\delta_1\delta_2,$$

$$\delta_1 = \frac{(2\omega_1^2 - \omega^2)}{2\omega_1^2}, \quad \delta_2 = \frac{(\omega^2 - 2\omega_2^2)}{2\omega_2^2}.$$

При малых  $\delta_1 \sim \chi$  можно считать, что амплитуда тяжелых частиц ( $A$ ) максимальна, а амплитуда легких ( $B$ ) равна нулю. Разложив  $A_1(n \pm 2)$  в ряд с периодом

2 и используя условие  $A_1 = A_2$ , получим следующее уравнение для амплитуды  $A$ :

$$\frac{d^2 A}{dx^2} - 2\delta_1\delta_2 A + \delta_2 \frac{\chi}{2} |A|^2 A = 0. \quad (14)$$

При нулевых условиях на бесконечности решение (14) при  $\chi > 0$  имеет форму шредингеровского солитона

$$A = 2\sqrt{\delta_1/\chi} \operatorname{sech} \sqrt{\delta_1\delta_2}(x - x_0). \quad (15)$$

В окрестности верхней граничной частоты  $\delta_2 \sim \chi$  можно получить уравнение для амплитуды легких атомов

$$\frac{d^2 B}{dx^2} - \delta_1\delta_2 B - \delta_1 \frac{\chi}{2} |B|^2 B = 0. \quad (16)$$

Локализованная мода имеет вид, аналогичный (15), однако при этом необходимо, чтобы изменился знак нелинейности  $\chi > 0$ . Очевидно, что для указанных мод фазовая модуляция отсутствует.

При изменении знака нелинейности в уравнении (14) сепаратрисные решения не существуют. Для получения решения в форме темного солитона необходимо изменение знака коэффициента  $\delta_1\delta_2$ , однако это возможно лишь в том случае, если частота  $\omega$  попадает в полосу пропускания цепочки.

Найденные в работе различные типы щелевых солитонов следует рассматривать как собственные нелинейные стационарные моды безграничной двухатомной решетки. В реальных кристаллах из-за наличия потерь для длительного существования этих мод необходима подкачка энергии, здесь важную роль играет способ возбуждения. При неавтономных режимах возбуждения можно говорить о вынужденных модах, которые отличаются от рассмотренных выше. В качестве иллюстрации приведем следующий пример.

Пусть возбуждение осуществляется заданной силой  $F \cos(\omega t - \pi n/2)$ , частота которой удовлетворяет условию  $\delta_1 \sim \chi$ . Уравнение для амплитуды тяжелых атомов на этой частоте примет вид

$$\frac{d^2 A}{dx^2} - \delta_1\delta_2 A + \frac{\chi}{2} \delta_2 A |A|^2 = F_0, \quad (17)$$

где  $F_0 = F\delta_2/2k$ . Решение будем искать в виде  $A = a(x) \exp(i\varphi(x))$ , причем, как следует из раздела 2, фазу можно считать постоянной. В результате получим

$$a = a_0 + \frac{\delta_1 - \frac{3\chi a_0^2}{2}}{\frac{1}{2}\sqrt{\chi(\delta_1 - \frac{\chi}{2}a_0^2)} \operatorname{ch} \left[ \sqrt{\delta_2 \left( \delta_1 - \frac{3\chi a_0^2}{2} \right)} (x - x_0) \right] + \frac{\chi a_0}{2}}, \quad (18)$$

где  $a_0$  удовлетворяет кубическому уравнению  $-\delta_1\delta_2 a_0 + \chi\delta_2 a_0^3/2 = F_0$ .

Неоднозначная зависимость  $a_0(F_0)$  приводит к бистабильности при возбуждении вынужденной моды (при заданной силе  $F_0$  возможно существование двух устойчивых мод); кроме того, ее форма отличается от функции (15). При  $x \rightarrow \pm\infty$  амплитуда  $a \rightarrow a_0$ , однако в данном случае ненулевые граничные условия имеют простой физический смысл: величина  $a_0$  является "вынужденным" решением (постоянным сдвигом) линейной цепочки.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 93-02-16059).

### Список литературы

- [1] S. Takeno, J. Hori. J. Phys. Soc. Jpn. **60**, 3, 947 (1991).
- [2] S. Bickham, S. Kiselev, A. Sievers. Phys. Rev. **B47**, 12, 14206 (1993).
- [3] В.М. Бурлаков, С.А. Киселев. ЖЭТФ **99**, 5, 1526 (1991).
- [4] D. Mills, S. Trullinger. Phys. Rev. **B36**, 2, 947 (1987).
- [5] A. Aceves, S. Wabnitz. Phys. Lett. **A141**, 1-2, 37 (1989).
- [6] А.В. Ведерко, О.Н. Ермакова, В.Ф. Марченко, А.П. Сухоруков. Письма в ЖТФ **21**, 19, 6 (1995).
- [7] H. Wintul, J. Marburger, E. Garmirl. Appl. Phys. Lett. **35**, 2, 379 (1979).
- [8] А. Ярив, П. Юх. Оптические волны в кристаллах. М. (1987). С. 660.
- [9] M. Aoki, S. Takeno, A. Sievers. J. Phys. Soc. Jpn. **62**, 12, 4295 (1993).
- [10] M. Aoki. J. Phys. Soc. Jpn. **61**, 9, 3024 (1992).
- [11] Ч. Киттель. Введение в физику твердого тела. М. (1978). С. 790.
- [12] С.А. Ковалев, О.В. Усашенко, О.А. Чубыкало. ФТТ **35**, 3, 693 (1993).